

DISSERTAÇÃO

O problema do caixeiro viajante: uma abordagem quântica com
codificação em múltiplas bases

Renato Gomes dos Reis
Orientador: Prof. Dr. Felipe Fernandes Fanchini

Universidade Estadual Paulista
Departamento de Ciências da Computação

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA – UNESP
CÂMPUS DE BAURU

O problema do caixeiro viajante: uma abordagem quântica
com codificação em múltiplas bases

Renato Gomes dos Reis

Prof. Dr. Felipe Fernandes Franquini

Dissertação apresentada à Faculdade de Ciências -
Unesp, Câmpus de Bauru, como parte das exigências
para a obtenção do título de Mestre em Ciência da Com-
putação

2025

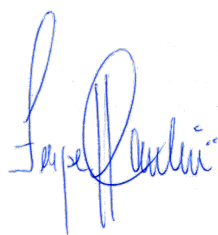
R375p Reis, Renato Gomes dos
O problema do caixeiro viajante : Uma abordagem
quântica com codificação em múltiplas bases / Renato
Gomes dos Reis. -- Bauru, 2025
219 p. : il., tabs.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista
(UNESP), Faculdade de Ciências, Bauru
Orientador: Felipe Fernandes Franquini

1. Computação Quântica. 2. Formalismo QUBO. 3.
Codificação em Múltiplas Bases. 4. MaxCut. 5.
Variational quantum eigensolver. I. Título.

ATA DA DEFESA PÚBLICA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE RENATO GOMES DOS REIS, DISCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO, DA FACULDADE DE CIÊNCIAS - CÂMPUS DE BAURU.

Aos 23 dias do mês de julho do ano de 2025, às 14h, por meio de Videoconferência, realizou-se a defesa de DISSERTAÇÃO DE MESTRADO de RENATO GOMES DOS REIS, intitulada **O PROBLEMA DO CAIXEIRO VIAJANTE: UMA ABORDAGEM QUÂNTICA COM CODIFICAÇÃO EM MÚLTIPLAS BASES**. A Comissão Examinadora foi constituída pelos seguintes membros: Prof. Dr. FELIPE FERNANDES FANCHINI (Orientador(a) - Participação Virtual) do(a) Departamento de Física / Faculdade de Ciências UnespCâmpus de Bauru, Prof. Dr. LUIZ GUSTAVO ESMENARD ARRUDA (Participação Virtual) do(a) LARC - Laboratório de Arquitetura e Redes de Computadores do Departamento de Engenharia de Computação e Sistemas Digitais / Escola Politécnica da Universidade de São Paulo (PCS-EPUSP)., Prof. Dr. ALEXANDRE DRINKO (Participação Virtual) do(a) Computação / UNESP - Universidade Estadual Paulista . Após a exposição pelo mestrando e arguição pelos membros da Comissão Examinadora que participaram do ato, de forma presencial e/ou virtual, o discente recebeu o conceito final APROVADO . Nada mais havendo, foi lavrada a presente ata, que após lida e aprovada, foi assinada pelo(a) Presidente(a) da Comissão Examinadora.



Prof. Dr. FELIPE FERNANDES FANCHINI

Como uma ode, dedica-se esta dissertação, ao egrégio Prof. Dr. Felipe Fernandes Fanchini, sempre coradato e cheio de prestesa. A esposa, Nalva, musa de um panteão de tantas divindades vivas, aos pais presentes, ao Rafael amigo cujo adjutório verteu a pedra bruta em diamante lapidado, aos colendos Professores Doutores, Misha (IMPA), Alexandre José Santana (UEM), pelo documento epistolar ao qual abriram-me as portas da academia, todos os funcionários da Faculdade de Ciências, todos, relicários de fino artista, a todos que anonimamente dedicaram-se para que findo fosse este trabalho.

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Doutor Felipe Fernandes Fanchini, pela ilibada orientação, destreza, espírito público neste hercúleo trabalho de orientar, a esposa, familiares, pela paciência infindável, ao amigo Rafael, sempre presente mesmo em horas difíceis, ao Igor, por tantas sugestões, aos pais pela fé infindável, a todos que de forma anônima, contribuíram para a confecção do trabalho.

“Metade de mim é feita de sonhos, a outra metade é de luta”.

Vladimir Maiakovski

RESUMO

Na teoria da complexidade computacional, o problema do caixeiro viajante (PCV) é um problema da classe NP-complexo em otimização combinatória, importante na ciência da computação teórica e na pesquisa operacional. Devido à natureza do problema, apresenta um grande número de variáveis, o que aumenta de forma significativa o custo computacional, desta forma, optou-se pela computação quântica, como base para estruturação de um algoritmo para resolução viável deste problema. Não obstante, a partir utilizando uma nova técnica que alude à denominada codificação em múltiplas bases, o que dá permissividade para resolver o problema com um número menor de qubits e desta forma reduzindo-se o custo computacional para a resolução deste problema com quatro e cinco instâncias. O presente trabalho contou com a técnica seminal da codificação em múltiplas bases, ideia egressa das redes neurais e que se mostra profícua na resolução de problemas de otimização combinatória.

ABSTRACT

In computational complexity theory, the travelling salesman problem (TSP) is an NP-complex problem in combinatorial optimisation, important in theoretical computer science and operational research. Due to the nature of the problem, it has a large number of variables, which significantly increases the computational cost, so quantum computing was chosen as the basis for structuring an algorithm to solve this problem feasibly. However, by using a new technique that alludes to designation in multi-basis, which gives permission to solve the problem with a smaller number of qubits and in this way it is reduced the computational cost of solving this problem with four or five instances. This work used the seminal technique of multibase encoding, an idea that comes from neural networks and which has proved useful in solving combinatorial optimisation problems.

Sumário

1	Introdução	13
1.1	Revisão da Literatura	15
1.2	Motivação do Tema Proposto	18
1.3	Relevância do Tema Proposto	20
1.4	Resultados Esperados	20
1.5	Metodologia	21
1.6	Considerações sobre a Introdução	23
2	Elementos da Computação Quântica	24
2.1	O qubit	24
2.1.1	Formalismo matemático	25
2.1.2	Espaços de Hilbert	25
2.2	Representações de Qubits	26
2.2.1	O Bit Clássico versus Qubit	26
2.2.2	A representação vetorial de um único qubit	27
2.2.3	Visualização Geométrica de um Qubit	27
2.2.4	Vetor de Bloch	32
2.3	Sistemas compostos	32
2.3.1	Produto Tensorial	32
2.3.1.1	Propriedades do Produto Tensorial	33
2.3.2	Sistema quânticos múltiplos	34
2.4	Excertos de Mecânica Quântica	34
2.4.1	Breve descrição Histórica	34
2.4.2	Formalismo Matemático	35
2.5	Dinâmica Unitária	36
2.5.1	Propriedades de uma Transformação Unitária	36
2.5.2	Equação de Schrödinger	39
2.6	Conclusões e Síntese do Capítulo 2	41
3	Portas e Circuitos Quânticos	42
3.1	Operações com Qubits	42
3.2	Exemplos de Portas Lógicas Quânticas	43

3.2.1	Portas lógicas de 1 qubit	43
3.2.1.1	Porta Identidade	43
3.2.1.2	Porta de Hadamard	43
3.2.1.3	Portas X, Y, Z	44
3.2.1.4	Porta Lógica P	45
3.2.1.5	Porta Lógica T	46
3.2.1.6	Porta Lógica S	46
3.2.1.7	Rotações Arbitrárias R_x, R_y e R_z	47
3.2.1.8	Porta Lógica $R_{\vec{n}}$	50
3.2.2	Portas Lógicas de 2 Qubits	50
3.2.2.1	Porta CNOT	50
3.2.2.2	Porta Controlada- Z	52
3.2.2.3	Porta Swap	53
3.2.2.4	Porta RZZ	54
3.2.3	Portas lógicas de 3 qubits	54
3.2.3.1	Porta Toffoli	55
3.3	Conceitos sobre Circuitos Quânticos	56
3.4	Propriedades dos Circuitos Quânticos	57
3.4.1	Medição em Mecânica Quântica	58
3.4.2	Conceito de Medição aplicado à Computação Quântica	60
3.4.3	Representação em forma de Diagrama de Circuitos Quânticos	63
3.5	Conclusões e Síntese do Capítulo 3	64
4	QUBO: <i>Quadratic Unconstrained Binary Optimization</i>	65
4.1	Formulação do Problema QUBO versão Clássica	65
4.1.1	Algumas Propriedades do Problema QUBO	67
4.2	Conclusões e Síntese do Capítulo 4	68
5	O Problema do Caixeiro Viajante	69
5.1	Histórico	69
5.2	Descrição do Problema	70
5.3	Formulação Matemática	71
5.4	Soluções do PCV por Algoritmos	73
5.4.1	Métodos Exatos	73
5.4.2	Métodos Heurísticos	74
5.4.3	Algoritmos de Aproximação	74
5.4.4	Casos Especiais	74
5.4.5	Complexidade Computacional	75
5.4.6	Algoritmo de Bellman–Held–Karp	75
5.5	Isomorfismo de Grafos	77
5.6	Conclusões e Síntese Capítulo 5	78

6	Mapeamento do Problema do Caixeiro Viajante em Hamiltonianos	80
6.1	Transcrição de um QUBO em um Hamiltoniano Quântico	80
6.2	Descrição do Problema do Caixeiro Viajante no Formalismo QUBO	82
6.2.1	Termos de H_A (Restrições do Ciclo)	83
6.2.2	Termo de H_B (Minimização do Custo)	84
6.3	Codificando em um arranjo de qubits	85
6.4	Descrição Simplificada do Problema do Caixeiro Viajante no Formalismo QUBO para 4 e 5 cidades	86
6.4.1	Hamiltoniano do Problema	87
6.5	Conclusões e Síntese Capítulo 6	88
7	Métodos de Otimização Quântica	89
7.1	Algoritmo VQE	89
7.1.1	A Definição do <i>Ansatz</i>	90
7.1.2	A medição e o cálculo do valor esperado	91
7.1.3	A Otimização Clássica	92
7.1.4	Pipeline do Algoritmo	95
7.2	Exemplificando para o caso de 4 cidades	96
7.2.1	Codificação do Problema	96
7.2.2	Restrições do Problema	97
7.2.3	Hamiltoniano do Problema	97
7.2.4	Cálculo do Valor Esperado e Minimização da Energia	98
7.3	Conclusões e Síntese do Capítulo 7	99
8	Codificação em Múltiplas Bases (MBE)	100
8.1	O Algoritmo <i>MaxCut</i>	100
8.2	Conversão do Formalismo QUBO em <i>Maxcut</i>	102
8.2.1	Exemplo Analítico: Transformação de um Problema QUBO em MaxCut	107
8.3	O Algoritmo de Codificação em Múltiplas Bases	111
8.3.1	Mapeamento e Redução de Qubits	111
8.3.2	A Função de Custo MBE e a Não Linearidade	112
8.3.3	Vantagens e Implicações	114
8.4	Conclusões e Síntese do Capítulo 8	114
9	Resultados e Discussões	116
9.1	Função custo para 4 e 5 cidades	116
9.2	Resultados do Formalismo MBE	120
9.2.1	Métrica de Avaliação	121
9.2.2	Discussão e Comparação dos Resultados	121
9.3	Conclusões e Síntese do Capítulo 9	124
10	Conclusões Gerais	126

A Topologia	149
A.1 Topologia Geral	149
A.2 Topologia Padrão	150
A.3 Definições e Propriedades Importantes	150
A.3.1 Espaços Métricos	152
A.4 Espaços de Hausdorff	153
A.5 Topologia Computacional	153
A.5.1 Principais Algoritmos por Área Temática	154
A.5.1.1 Algoritmos para 3-Variedades	154
A.5.1.2 Algoritmos de Conversão	155
A.5.1.3 Teoria Algorítmica dos Nós	155
B Geometria Computacional	157
B.1 Geometria Computacional Numérica	157
B.2 Geometria Computacional Combinatória	157
C Comparação entre o Formalismo QUBO e MaxCut, Utilizando Método Analítico	159
C.1 Conversão do Formalismo QUBO em MaxCut	159
C.1.0.1 Restrições do Problema, Formulação Geométrica	164
D Estrutura do VQE e Formalismo de Rede Tensorial	172
D.1 Características do Algoritmo MBE	174
D.2 <i>Função Custo e suas Propriedades</i>	183
E Variedades	189
E.1 Variedades Topológicas	189
E.2 Variedades Diferenciáveis	190
E.2.1 Esferas	192
E.2.2 n -Esferas como Variedades Suaves	194
E.2.3 Esfera de Bloch como Variedade Diferenciável	195
E.2.3.1 Cartas e o Homeomorfismo da Esfera S^2	196
E.2.3.2 Atlas, a Esfera de Bloch com Estrutura de Variedade Diferenciável	198
E.2.3.3 Cartas no Caso da Projeção Estereográfica	198
E.2.3.4 Cartas Norte e Sul	199
E.2.3.5 Exemplos Aplicados à Esfera de Bloch	199
E.2.3.6 As seis Cartas que Cobrem a 2-Esfera	200
E.2.3.7 Generalização das coordenadas	202
E.2.3.8 Descrição da Esfera	202
E.2.3.9 Definição do Atlas	203
E.2.3.10 Esfera de Bloch como Variedade Diferenciável	204
E.2.3.11 Representação dos Vectors de Bloch em Coordenadas Esféricas .	204
E.2.3.12 Coordenadas Polares	204

E.2.3.13	Cartas	205
E.3	Fibrado de Hopf	208
E.3.1	Descrição Inicial	208
E.3.1.1	Sobre a Esfera	209
E.3.1.2	Realização via Números Complexos	209
E.3.1.3	Realização via Quatérnios	210
E.3.1.4	Realização via Construção de Hopf	210
E.3.1.5	Equivariância de $\text{Spin}(3)$	210
E.3.1.6	1-Esfera, 3-Esfera, 7-Esfera e 15-Esfera, Via Normas e Projeções	211
E.3.1.7	Por meio de Construção	211
E.3.1.8	Intuição Física sobre a Esfera de Bloch e o Fibrado de Hopf	212
F	Significado Geométrico das Matrizes de Pauli	213
F.1	Introdução	213
G	Geometrias de Thurston	216
G.1	Definição	216

Capítulo 1

Introdução

Os avanços recentes na computação quântica têm possibilitado novas abordagens para resolver problemas complexos de otimização combinatória, como o Problema do Caixeiro Viajante (PCV) [1, 2]. Este problema clássico, que busca a rota mais curta para visitar um conjunto de cidades, apresenta um crescimento exponencial na complexidade à medida que o número de cidades aumenta, tornando sua solução impraticável para métodos clássicos em grande escala. Neste sentido, algoritmos quânticos, como o *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) [3–5], emergem como uma ferramenta promissora para abordar tais desafios em Sistemas Quânticos de Escala Intermediária e Ruidosos (NISQ, anglicismo cujo acrônimo significa *Noisy Intermediate-Scale Quantum*), [6, 7], utilizando um ciclo iterativo de otimização entre processadores quânticos e clássicos.

Neste trabalho, nós iremos explorar uma técnica de codificação de informação no contexto do VQE: a codificação em múltiplas bases [8]. Desenvolvida para otimizar a utilização de qubits, esta técnica permite representar variáveis em diferentes eixos dos qubits, como Z e X , reduzindo significativamente a quantidade de qubits necessários e simplificando a implementação dos circuitos.¹

A combinação de observáveis em diferentes bases possibilita uma exploração mais eficiente do espaço de soluções, o que potencialmente aumenta a precisão e a estabilidade dos algoritmos mesmo em presença de ruído quântico. Assim, a codificação em múltiplas bases tem o potencial de viabilizar a resolução de problemas de otimização combinatória em hardware quântico disponível atualmente, sendo este o foco de nossas pesquisas.

¹Neste caso, utiliza-se os três eixos de uma Esfera de Bloch, cuja representação se dá por $\mathbb{S}^2 \subseteq \mathbb{R}^3$. Para representar o estado de um qubit, o vetor de estado se origina no centro da esfera e termina em um ponto com coordenadas (X, Y, Z) . Em particular, quanto ao eixo Z representa a probabilidade do qubit ser medido como 0 ou 1, as duas bases ortogonais Z de um qubit, são, $|0\rangle$ e $|1\rangle$, quando se fala sobre os estados de base do qubit, implicitamente refere-se aos estados de base Z como estados da base computacional. Quanto ao eixo x representa a parte real do vetor de estado, os dois estados ortogonais da base X são, $|+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ e $|-\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$.

Nosso objetivo nestes estudos é aplicarmos essa abordagem ao PCV, mapeando sua função custo em um Hamiltoniano, quântico, que é posteriormente resolvido usando o *VQE* com a codificação em múltiplas bases. A metodologia proposta promete não apenas superar as limitações de recursos dos processadores quânticos atuais, mas também fornecer *insights* sobre a eficácia da combinação de técnicas variacionais com estas novas estratégias de codificação. Este estudo irá contribuir para a consolidação de métodos híbridos quântico-clássicos como soluções viáveis para problemas reais de otimização, em especial o PCV.

Objetivando-se otimizar o processo de pesquisa, dividiu-se este trabalho em dez capítulos. No Capítulo 2, apresentamos uma revisão sobre os fundamentos da computação quântica, explicando os conceitos essenciais que constituem este ramo da computação, a metodologia, incluindo estados quânticos, operadores e medições [9].

No Capítulo 3, introduzimos os circuitos quânticos e as portas lógicas, elementos fundamentais para a construção e manipulação de algoritmos quânticos. Esses conceitos são a base estrutural para a implementação das técnicas propostas neste trabalho.

No Capítulo 4, abordar-se-á o formalismo *QUBO* (que é o acróstico em inglês de *Quadratic Unconstrained Binary Optimization*) [10], que utilizamos para resolver o Problema do Caixeiro Viajante, (acróstico PCV). Este formalismo, transforma o PCV em um problema de otimização binário que pode ser resolvido utilizando ferramentas quânticas e clássicas.

No Capítulo 5, introduzir-se-á formalmente o Problema do Caixeiro Viajante, detalhando sua formulação e explorando alguns dos principais algoritmos clássicos utilizados para sua solução [11–17], fornecendo um contexto histórico [1, 2, 18, 19] e técnico.

No Capítulo 6, descrevemos como mapeamos o Problema do Caixeiro Viajante no formalismo *QUBO* e como este pode ser traduzido em um Hamiltoniano quântico [20]. Demonstramos que problemas de otimização combinatória descritos no formalismo *QUBO* podem ser resolvidos por meio da determinação do estado fundamental de um Hamiltoniano. Essa abordagem híbrida será utilizada como estratégia para resolver o problema em computadores quânticos.

No Capítulo 7, começamos a trabalhar na solução do problema. Nós começamos apresentando formalmente o *VQE* e mostramos como este pode ser usado para resolver o PCV. No capítulo 8 apresentamos a estratégia de codificação em múltiplas bases. Essa metodologia visa otimizar o uso de recursos quânticos e aumentar a eficiência na resolução do PCV. Nosso objetivo final será demonstrar como a combinação do *VQE* com a codificação em múltiplas bases pode superar limitações práticas e fornecer soluções promissoras para problemas complexos de otimização. No capítulo 9 apresentamos os resultados e discussões e concluímos essa dissertação no capítulo 10.

1.1 Revisão da Literatura

• Histórico da Computação Quântica

O desenvolvimento da computação quântica tem suas raízes em avanços teóricos e experimentais, sendo formalmente estruturado a partir de três trabalhos seminais. O primeiro, do geômetra-álgebra soviético Iuri Ivanovitch Manin, intitulado *Вычислимое и невычислимое* (em russo: Computável e Incomputável) [21], sugeriu o uso de fenômenos quânticos para novos paradigmas computacionais.

O físico norte-americano Paul Benioff, em sua obra *The Computer as a Physical System*, [22], que apresentou um modelo teórico de uma máquina de Turing quântica, demonstrando que a computação poderia ser implementada dentro das leis da mecânica quântica de maneira reversível. Por fim, o terceiro, de Richard Feynman, físico quântico norte-americano, *Simulating Physics with Computers*, [23], cuja propositura é a ideia de utilizar sistemas quânticos para simular processos físicos de forma eficiente, consolidando o potencial da computação quântica para aplicações práticas.

• Algoritmos Quânticos, Híbridos e o Formalismo QUBO e MaxCut

Posteriormente, surgem os algoritmos quânticos, que são executados em um modelo realista de computação quântica, sendo o modelo mais comumente utilizado o modelo de circuito quântico, como por exemplo, o VQE, (neste caso um algoritmo híbrido), dentre outros, além dos algoritmos. Além dos algoritmos têm-se formalismos que foram adaptado para a nova modalidade de computação, como é o caso do formalismo QUBO, capaz de solucionar problemas de otimização combinatória, sendo um problema da classe NP-complexa, [20].

Este formalismo fora introduzido por Hammer e Rudeanu, em 1968, [24], um de seus usos foi a motivação para problemas envolvendo logística, cuja inspiração veio do trabalho de Witzgall, do ano de 1975, [25].

Um outro algoritmo que se fará uso nesta dissertação será O conhecido problema MaxCut, que consiste em determinar uma partição dos vértices de um dado grafo tal que a soma dos pesos das arestas com um nó final em cada conjunto seja máxima. Não obstante, de enunciado trivial, sua resolução é extremamente difícil.

Este problema é um dos primeiros problemas cuja NP-complexidade fora estabelecida por Karp, [26]. Observe que o problema permanece NP-complexo mesmo para pesos unitários de arestas, [27]. A solução do problema MaxCut foi abordada por programação matemática.

Em termos de variáveis para cada vértice, uma formulação de programação quadrática inteira é apresentada em [28], existem outras formulações de programação linear inteira deste problema usando variáveis booleanas, [29].

• O Algoritmo MBE na Resolução do PCV

Neste trabalho vamos desenvolver o estudo do Problema do Caixeiro Viajante fazendo uso do formalismo QUBO, tendo como já se discorreu um histórico consolidado como um problema combinatório. A relevância deste formalismo cresce devido à possibilidade de reformulação de diversos problemas, permitindo a introdução de penalidades quadráticas para substituir restrições explícitas, [20].

De fato, qualquer problema discreto linear ou quadrático, determinístico e com restrições lineares em variáveis inteiras limitadas, pode ser reescrito no formalismo QUBO por meio desta técnica, especialmente em problemas de otimização combinatória.

Nos últimos anos, avanços significativos foram alcançados tanto do ponto de vista experimental quanto na formulação matemática da área. Como destacado por Glover, Kochenberger e Du [30], o modelo QUBO ganhou projeção devido à sua capacidade de unificar uma ampla gama de problemas de otimização combinatória. Além disso, verificou-se sua forte associação com o formalismo de Ising, amplamente utilizado na física estatística e em algoritmos de *quantum annealing*, [31]. Essa abordagem também tem sido explorada na computação neuromórfica, [32, 33].

O desenvolvimento de computadores quânticos dedicados à resolução de problemas QUBO tem avançado rapidamente. Modelos experimentais de computação quântica desenvolvidos pela D-Wave Systems, [10] e computadores neuromórficos da IBM [34], vêm sendo utilizados para validar e explorar as capacidades desse formalismo.

A experiência acumulada pelas comunidades de computação clássica e quântica reforçando não apenas o potencial do modelo QUBO, mas também sua eficácia como alternativa às metodologias tradicionais de otimização. Muitos estudos dentro dessa linha concentram-se em problemas clássicos da teoria dos grafos, um dos pilares desta dissertação. Como leciona Andrew Lucas, [20], formulações de otimização combinatória no contexto de teoria dos grafos, é fundamental para resolução coerente de problemas de otimização combinatória, além também de discorrer sobre os circuitos hamiltonianos.

Outros autores, como Calude, [35], exploram a conversão do problema do isomorfismo de grafos no formalismo QUBO, comparando diferentes abordagens. Chapuis [36] descreve a formulação do problema de clique máximo, [37], nesse formalismo e sua resolução por meio do *quantum annealing*,

[32] utilizando a plataforma D-Wave 2X, [38] explora a resolução do problema de fluxo máximo com o chip DW 2000Q-6. Além disso, trabalhos como os de Pelofske, [39], abordam problemas de Max-Cut, [40, 41] e clique máximo ponderado utilizando técnicas baseadas no formalismo QUBO, sendo que Glover et al. [42] forneceram uma introdução sistemática à conversão de modelos de otimização combinatória para este formalismo sob uma perspectiva matemática.

Além da teoria dos grafos, há um crescente interesse na aplicação deste formalismo também em aprendizado de máquina. Bauckhage e Hong, [43, 44] exploraram a formulação do problema k -medoids como um problema QUBO, utilizando a norma l_1 , [45]. Já Date [46], analisou sua aplicação em regressão linear, máquinas de vetores de suporte *SVM*, (acróstico em inglês de *Support-Vector Machine*) e *k-means clustering*. Com o avanço da computação quântica, esses problemas tradicionais vêm sendo reformulados para serem resolvidos por algoritmos quânticos otimizados. Como podemos notar, as aplicações são inúmeras. O foco central desta dissertação trata-se da utilização do formalismo QUBO na resolução de problemas de logística, com um diferencial metodológico: a incorporação da codificação em múltiplas bases.

A literatura contém diversos estudos que exploram o uso da computação quântica para resolver o problema do Caixeiro Viajante [47, 48], em especial fazendo uso do formalismo QUBO, [30]. No entanto, até o momento, não foram identificados trabalhos que investiguem a resolução desse problema utilizando esta técnica. Esse conceito, introduzido por Taylor L. Patti et al., [49], representa uma inovação metodológica ao permitir a representação eficiente das variáveis do problema em diferentes eixos da Esfera de Bloch, reduzindo a quantidade de qubits necessários, como já fora supra descrito e explorando novas estratégias de otimização. Essa abordagem será implementada utilizando o algoritmo *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) [50, 51], um algoritmo híbrido, de acordo com a lição de McClean et al. [52].

Vale enfatizar que o uso do formalismo de múltiplas bases transcende a otimização variacional quântica, sendo também aplicado em problemas de redes neurais, [53].

O objetivo desta dissertação é apresentar a codificação em múltiplas bases (MBE, acróstico em inglês de *Multibasis-Encodings*) para a representação eficiente de grafos no modelo de Ising [54–56]. Essa estratégia mapeia $\frac{n}{2}$ vértices para operadores σ^x , permitindo a codificação do grafo com apenas $\frac{n}{2}$ qubits, em que os vizinhos mais próximos são conectados por um anel tensorial, [49].

No contexto do problema Max-Cut, [57], essa abordagem otimiza a solução por meio de medições de qubit único. O formalismo MBE permite mapear as arestas ou vértices de um único grafo em diferentes bases quânticas, explorando simultaneamente as bases σ^z e σ^x . Como veremos, essa abordagem reduz significativamente os recursos computacionais necessários para a execução

de algoritmos de otimização quântica, otimizando a alocação de qubits e aprimorando a eficiência do processamento. Além disso, a codificação em múltiplas bases tem o potencial de melhorar a eficiência do algoritmo, visto que usando menos qubits evitamos o que se convencionou denominar de *barren plateaus*, [58], que são regiões do espaço de parâmetros em que o gradiente da função de custo se torna exponencialmente pequeno à medida que o número de qubits aumenta, portanto, de forma inversamente proporcional, tornando a otimização inviável. Esse fenômeno ocorre com frequência em circuitos quânticos profundos, [59], em que a paisagem de otimização, [52, 60–62], se torna essencialmente plana, dificultando a convergência para mínimos globais.

Reduzindo o número de qubits necessários e controlando a profundidade do circuito, a codificação em múltiplas bases pode mitigar esse problema, tornando a otimização mais eficiente e garantindo uma melhor exploração do espaço de parâmetros.

Sendo assim, a combinação do formalismo MBE com funções de ativação não lineares e anéis tensoriais fatorados, abordagem de rede tensorial fatorada exata² [49], tem o potencial de viabilizar a resolução de problemas complexos. Esta será a análise que desenvolver-se-á em nossas perquirições, verificando a eficiência da abordagem MBE, com circuitos rasos a fim de reduzir a complexidade computacional que, potencialmente, pode possibilitar sua implementação em larga escala.

1.2 Motivação do Tema Proposto

“Com a introdução de grandezas variáveis e a extensão de sua variabilidade ao infinitamente pequeno e infinitamente grande – então a matemática, em outros aspectos tão estritamente morais, caiu em desgraça: provou da maçã do conhecimento, que lhe abriu uma carreira de conquistas as mais colossais, mas ao mesmo tempo um caminho de erro. O estado virgem de validade absoluta e certeza irrefutável de tudo que é matemático se foi para sempre; a matemática entrou no reino da controvérsia, e chegamos ao ponto em que a maioria das pessoas diferenciam e integram não apenas porque tem consciência do que estão fazendo, mas da fé pura, porque até agora o resultado está sempre certo.”

Engels - Anti-Dühring

²Redes tensoriais são uma classe de funções de onda variacionais usadas no estudo de sistemas quânticos de muitos corpos. Relativamente ao diagrama de Penrose pode ser visto como um grafo em que os nós (ou vértices) representam tensores individuais, enquanto as arestas representam a soma sobre um índice. Índices livres são representados como arestas anexadas a um único vértice.

A pesquisa apresentada reúne conceitos de diversas áreas do conhecimento, os conectando de maneira equilibrada e integrando aplicações práticas, especialmente na indústria, uma vez que o cerne do problema abordado está na logística. Para tornar esse tema exequível, é essencial recorrer a uma sólida base matemática, em particular à teoria dos problemas de otimização combinatória, [63]. Em qualquer problema matemático, há sempre um algoritmo que estabelece um sequenciamento lógico para sua resolução. Com a evolução da computação moderna, esses algoritmos têm se tornado cada vez mais sofisticados e aplicáveis a problemas interdisciplinares.

Com o avanço de uma nova abordagem computacional, a computação quântica, originada a partir de diversos trabalhos que culminaram no início da década de 1980, se abre um novo campo de possibilidades. Fundamentada na mecânica quântica, que teve seu desenvolvimento no início do século XX, essa nova modalidade de computação integra conceitos de diferentes áreas da matemática, com interseções até mesmo com a Teoria da Relatividade Restrita e, possivelmente, com a Relatividade Geral, [64–69]. O uso do formalismo da mecânica quântica para a computação representa um avanço significativo, permitindo a criação de algoritmos que antes eram impraticáveis.

O desenvolvimento desta dissertação seguiu essa trajetória evolutiva: partindo do formalismo da computação quântica, exploramos diferentes classes de algoritmos e por fim, focamos nos algoritmos quânticos e híbridos. Para a modelagem do problema, optamos pelo formalismo *QUBO*, [20], que possui uma correspondência direta com o modelo de Ising via isomorfismo. Quanto à implementação computacional, utilizamos o *Qiskit*, uma biblioteca que se baseia na linguagem Python, mas apresenta um layout diferenciado e amplamente utilizado em computação quântica.

A abordagem escolhida nesta pesquisa foi um algoritmo híbrido, o *Variational Quantum Eigensolver* (VQE), [70], que busca a minimização da energia por meio de um formalismo amplamente utilizado na mecânica analítica e quântica: o Hamiltoniano. Esse método se conecta diretamente com a análise tensorial, em particular o produto tensorial, um elemento essencial para algoritmos VQE e para a codificação de informações em múltiplas bases, aspecto central do formalismo explorado nesta dissertação.

Além disso, a teoria dos grafos, [71, 72], em particular os grafos planares, [71, 73, 74], teve um papel fundamental na estruturação da pesquisa, assim como conceitos topológicos, que, mesmo de forma implícita, permeiam a formulação do problema. O grande mérito deste trabalho está na originalidade e no potencial do formalismo proposto, demonstrando sua relevância tanto na pesquisa científica quanto no desenvolvimento tecnológico.

Dessa forma, todos os pontos abordados reforçam a relevância do tema escolhido, evidenciando

sua importância no avanço da computação quântica e suas aplicações em otimização, logística e outras áreas da ciência e da tecnologia.

1.3 Relevância do Tema Proposto

O tema abordado parte de um problema clássico, que pode ser resolvido de diversas maneiras, com diferentes algoritmos, sendo alguns deles discutidos ao longo desta dissertação. O que torna essa abordagem relevante é justamente a originalidade da solução proposta: o uso de um algoritmo híbrido aliado à lógica da computação quântica, trazendo novas possibilidades para a resolução do problema.

Problemas logísticos podem envolver um grande número de variáveis, e, mesmo em sua forma mais simples, conforme o número de cidades aumenta, a complexidade e o custo computacional crescem rapidamente.

A computação quântica surge como uma alternativa promissora para lidar com esse tipo de desafio em um futuro. O uso de algoritmos quânticos, como a abordagem de codificação em múltiplas bases, permite reduzir significativamente o custo computacional, tornando a solução mais eficiente e viável, à médio e longo prazo, para problemas de alta complexidade.

1.4 Resultados Esperados

A técnica apresentada nesta dissertação, denominada codificação em múltiplas bases (MBE), busca aprimorar o processo de otimização, aumentando a eficiência dos algoritmos dessa classe. A principal ideia por trás dessa abordagem é permitir a representação de variáveis em diferentes bases computacionais, proporcionando uma maior flexibilidade na formulação de problemas quânticos.

O desenvolvimento dessa metodologia foi introduzido por T. L. Patti et al. em 2022 [49], como já descrito anteriormente e tem como principal vantagem a redução do número de qubits necessários para a resolução do problema, tornando sua implementação mais escalável e eficiente.

Se espera que essa abordagem supere outras classes de algoritmos, especialmente os quânticos tradicionais, abrindo novas possibilidades para aplicações em problemas de logística e otimização combinatória. Diferente da codificação convencional, em que cada variável binária é atribuída a um único qubit e os cálculos são predominantemente realizados na base computacional Z , a codificação em múltiplas bases distribui as variáveis entre diferentes eixos dos qubits. Isso permite otimizações simultâneas em diferentes direções dentro do espaço de Hilbert, aumentando a

capacidade expressiva do circuito quântico.

Para exemplificar, considere um problema formulado em termos de variáveis binárias. Nesta abordagem, metade das variáveis pode ser mapeada no eixo Z e a outra metade no eixo X . Essa distribuição melhora a expressividade do circuito e otimiza a busca pelo estado fundamental, tornando o processo de minimização mais eficiente e robusto. É fazendo uso desse formalismo que iremos explorar a solução problema do caixeiro viajante.

1.5 Metodologia

Objetivando-se o desenvolvimento da presente dissertação, estabelecemos uma sequência estruturada de etapas para investigar a formulação e implementação do Problema do Caixeiro Viajante em algoritmos de otimização quântica. Essa metodologia foi desenvolvida de forma a permitir tanto a exploração teórica quanto a implementação prática do problema utilizando métodos egressos da computação quântica.

No **Capítulo 1, Introdução**, é apresentado em linhas gerais a dissertação em si, recorrendo-se sobre sua estrutura, características, objetivos e relevância do tema escolhido e proposto.

No **Capítulo 2**, apresentaram-se os elementos fundamentais da computação quântica, fornecendo o arcabouço teórico necessário para o desenvolvimento da pesquisa. Aborda-se neste capítulo conceitos como qubits, espaços de Hilbert, representação vetorial, produto tensorial e dinâmica unitária, destacando as propriedades matemáticas que fundamentam os algoritmos quânticos. Essa base teórica é essencial para a correta formulação dos circuitos quânticos utilizados ao longo do trabalho.

No **Capítulo 3**, explorou-se as operações quânticas fundamentais e a construção de circuitos quânticos. São discutidas portas quânticas de um e dois qubits, incluindo as portas de Pauli (X , Y , Z), egressas da ideia das matrizes de Pauli, Hadamard (H), rotações arbitrárias (R_x , R_y , R_z), porta CNOT, entre outras. Esse conhecimento é aplicado na formulação dos circuitos utilizados para resolver o PCV via algoritmos variacionais.

No **Capítulo 4**, discutiu-se a temática do PCV no formalismo *Quadratic Unconstrained Binary Optimization* (QUBO). O problema é reformulado de maneira a ser representado como uma função quadrática de variáveis binárias, permitindo sua conversão para um Hamiltoniano quântico. Essa abordagem facilita a implementação do problema em dispositivos quânticos e permite o uso do algoritmo VQE para sua resolução.

No **Capítulo 5**, detalhou-se a formulação matemática do PCV, apresentando diferentes abor-

dagens clássicas para sua solução. Discorreu-se *en passant* por métodos exatos, heurísticos e de aproximação, além de discutir sua complexidade computacional. Essa análise justifica o interesse em métodos quânticos para resolver o problema de forma mais eficiente do que os algoritmos clássicos.

No **Capítulo 6**, realizou-se a transcrição do problema do Caixeiro Viajante para um Hamiltoniano quântico. Apresentou-se a formulação das restrições como penalidades no Hamiltoniano e descrevemos a conversão do modelo QUBO para um modelo Ising. Além disso, exploramos uma simplificação específica para instâncias menores do problema, como os casos de 4 e 5 cidades, reduzindo o número de qubits necessários.

No **Capítulo 7**, começamos a trabalhar na solução do problema, apresentando formalmente o *Variational Quantum Eigensolver* como a principal abordagem de otimização quântica considerada neste trabalho. Descrevemos suas três etapas principais e discutimos como o VQE pode ser utilizado para resolver o Problema do Caixeiro Viajante.

No **Capítulo 8**, introduzimos a estratégia de codificação em múltiplas bases, uma metodologia desenvolvida com o objetivo de otimizar o uso de recursos quânticos e aumentar a eficiência na resolução do PCV. Discutimos como essa técnica pode ser integrada ao VQE e as vantagens que ela oferece frente a limitações práticas da implementação em hardware quântico atual.

No **Capítulo 9**, apresentamos os resultados obtidos nos experimentos realizados, tanto no VQE, a partir do formalismo QUBO, até as aplicações do MaxCut e incluindo-se também os resultados obtidos utilizando o MBE, que é o escopo da nossa dissertação. Analisamos o desempenho dos métodos, comparando os diferentes métodos. As discussões são conduzidas à luz dos objetivos propostos e destacam as principais contribuições da abordagem proposta.

Já no **Capítulo 10**, concluímos esta dissertação, momento em que retomamos os principais pontos abordados, refletimos sobre as limitações do trabalho e sugerimos possíveis direções para pesquisas futuras no uso de algoritmos variacionais e estratégias de codificação avançadas na solução de problemas complexos de otimização combinatória.

Ao final tem-se os **Apêndices**, em que temas que dão subsídios ou são complementares a assuntos que figuram na dissertação, pretende-se de acordo com as exigências dos capítulos remeter-se aos apêndices para esclarecimentos ou mesmo verificação de justificativas de resultados.

1.6 Considerações sobre a Introdução

Nesta Introdução, fizemos uma síntese do que será a dissertação, as técnicas a serem utilizadas em cada Capítulo, o ineditismo da técnica e o fulcro deste trabalho que é a resolução de um problema clássico da otimização combinatória, que é o PCV aplicando técnicas egressas da computação quântica, em particular, a codificação em múltiplas bases. Trata-se de um trabalho exordial, que pretende-se sirva de inspiração e motive outros na mesma área e temática da pesquisa que aqui se inicia.

Capítulo 2

Elementos da Computação Quântica

A fim de se introduzir os conceitos fundamentais da computação quântica, neste capítulo iremos descrever de maneira formal o qubit, sistemas compostos, medidas e dinâmica unitária. Esse ferramental será a base do desenvolvimento dos algoritmos que serão utilizados para a resolução dos problemas propostos.

2.1 O qubit

No que tange a descrição matemática de um qubit, isso traz a baila um ponto de vista puramente estético, em que reside a beleza de tratá-los como entidades abstratas é o que dá permissividade a construção de uma teoria geral de computação e informação quânticas que não depende de um sistema específico para sua realização. Uma definição geral de um qubit que enseja descrevê-lo como um objeto físico, descrito por um formalismo matemático, como já descrito acima, particularmente, há uma representação geométrica, que pode ser útil na descrição de um modelo de um sistema físico¹

¹De uma maneira mais formal, pode-se introduzir um qubit como sendo uma tripla $(\mathcal{H}, X, Z)$, que consiste em um espaço de Hilbert separável $\mathcal{H}$ e um par de operadores hermitianos X, Z atuando em um $\mathcal{H}$, tal que $X^2 = Z^2 = Id$ e $X, Z = XZ + ZX = 0$, (o o espaço de estado é $\mathbb{CP}^1$). Observe-se que por esta definição, captura-se a noção intuitiva de observáveis mutuamente incompatíveis. Seja a 'base computacional' uma autobase de Z e a autobase de Hadamard uma autobase de X . Então, pode-se afirmar que a relação anticomutativa $XZ + ZX = 0$ garante que qualquer vetor na primeira, forma um ângulo de 45° com qualquer vetor na segunda. Pode-se ainda definir um qubit como sendo um sistema de dois níveis, cujo espaço de Hilbert é equivalente a $\mathbb{C}^2$. As matrizes de Pauli, juntamente com a identidade, formam uma base para matrizes Hermitianas 2×2 , tem-se que $\mathcal{B} = \{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, \mathbb{1}\}$, em que as matrizes foram representadas na base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. Em suma, o qubit implica a existência de uma isometria $V : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}^2 \otimes \mathcal{H}'$ sob a qual $Z \cong \sigma_z, X \cong \sigma_x$, e $|\psi\rangle \cong |\psi'\rangle \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathcal{H}'$, dando-nos uma identificação do qubit de uma forma com maior nível de abstração, $|\psi\rangle, Z, X$ com um qubit, mais tangível, metaforicamente falando, ou seja, o espaço $\mathbb{C}^2$ e sua álgebra de operadores, dos quais $\sigma_Z \sigma_X$ formam uma base linear.

2.1.1 Formalismo matemático

Objetivando-se dar um tratamento matemático aos qubits, é necessário recorrer a alguns conceitos como os espaço de Hilbert (nome é uma homenagem ao matemático alemão David Hilbert), grupos de Lie, conceitos de Álgebra Linear e apenas citar-se-á *en passant*, variedades, sendo que estas últimas não serão escopo da presente dissertação, apenas serão descritas para fins ilustrativos.

Portanto, não terão um uso ou aplicação sistemática e rigorosa, podendo figurar de forma implícita e intuitiva em situações que envolva em particular a Esfera de Bloch (nome dado em homenagem ao físico suíço-americano, quem primeiro a descreveu), que será o ponto de culminância desta secção.

A inserção de conceitos matemáticos subjacentes serão feitos conforme a necessidade do desenvolvimento.

2.1.2 Espaços de Hilbert

No que tange os espaços de Hilbert, que dão permissividade para que métodos de álgebra linear e do cálculo sejam generalizados de espaços vetoriais euclidianos, cuja dimensão é finita, para espaços que podem ser de dimensão infinita, tem grande relevância tanto no desenvolvimento do formalismo matemático tanto da mecânica quanto da computação quântica [9].

Formalmente, um espaço de Hilbert é um espaço vetorial equipado com um produto interno que induz uma função distância para a qual o espaço é um espaço métrico completo [75].

Definição 2.1.1 (Espaços de Hilbert Caso Complexo, [75]). *Seja $\mathcal{H}$ um espaço vetorial sobre o corpo $\mathbb{F} \in \mathbb{C}$ (um corpo é um conjunto no qual adição, subtração, multiplicação e divisão são definidas e se comportam como operações correspondentes em números racionais e reais, os números complexos são também um corpo). Seja $(\mathcal{H}, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}})$, um espaço com produto interno. Seja $d : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$, uma métrica induzida pela norma do produto interno $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$. Seja $(\mathcal{H}, d)$ um espaço métrico completo. Então, $\mathcal{H}$ é um espaço de Hilbert sobre um corpo $\mathbb{F}$. Um espaço de Hilbert completo², portanto, trata-se de um espaço vetorial com um produto interno, (pela definição), que também é completo no sentido métrico, (fato também egresso da definição), significando que toda sequência de Cauchy no espaço em tela converge para um ponto neste espaço.*

²Um espaço de Hilbert é um caso especial de um espaço de Banach, pois, trata-se de é um espaço vetorial normado completo.

2.2 Representações de Qubits

O exórdio desta secção é o que já fora descrito na secção (2.1), que versa sobre o qubit, ainda de forma bem incipiente. Mas, é natural ao menos dar uma descrição breve do bit, para comparação.

2.2.1 O Bit Clássico versus Qubit

Um dígito binário, que caracteriza-se como 0 ou 1, utiliza-se para representar informações em computadores clássicos. Quando calculada a média de ambos os seus estados, $\{0, 1\}$, um dígito binário pode representar até um bit de informação de Shannon.

Nesta acepção, um bit é a unidade básica de informação, entretanto, bit tratar-se-á como sendo sinônimo de dígito binário. Na informática clássica, um bit processado é implementado por um sistema de dois níveis de baixa tensão e ao se realizar a mudança de um destes dois níveis para o outro, um local conhecido como *zona proibida* entre dois níveis lógicos deve ser transposto o mais rapidamente possível, pois a tensão elétrica não se pode mudar de um nível para outro instantaneamente.

Existem dois resultados possíveis para a medição de um qubit, considerando-se os valores $\{0, 1\}$, como um bit. Não obstante, enquanto o estado de um bit só pode ser binário $\{0, 1\}$, o estado geral de um qubit consoante à mecânica quântica pode ser arbitrariamente uma superposição coerente de todos os estados computáveis simultaneamente [9]. Além disso, enquanto uma medição de um bit clássico não perturbaria o seu estado, uma medição de um qubit destruiria a sua coerência e perturbaria irrevogavelmente o estado de superposição.

É possível codificar totalmente um bit em um qubit. No entanto, um qubit pode conter mais informações, por exemplo, até dois bits usando codificação superdensa.

Para um sistema de n componentes, uma descrição completa de seu estado na física clássica requer apenas n bits, enquanto na física quântica um sistema de n qubits requer 2^n números complexos [76].

- **Notação de Dirac**

Observação 2.2.1. *Por uma questão de conveniência, a fim de se representar o estado quântico utilizar-se-á doravante a notação que é encontrada em [77], que segue abaixo.*

2.2.2 A representação vetorial de um único qubit

Dá-se pela equação infra descrita:

$$|a\rangle = v_0|0\rangle + v_1|1\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} v_0 \\ v_1 \end{bmatrix}. \quad (2.1)$$

Aqui, v_0 e v_1 são as amplitudes de probabilidade complexas do qubit, valores cujo módulo ao quadrado determinam a probabilidade de 0 ou 1, ao medir-se o estado do qubit. O valor zero é representado por $|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ e o valor um é representado por $|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$. O produto tensorial, também conhecido como de Kronecker, é usado para combinar estados quânticos. O estado combinado para um registro de qubit é o produto tensorial dos qubits constituintes. O produto tensorial é denotado por $\otimes$, como será descrito na subsecção (2.3.1).

2.2.3 Visualização Geométrica de um Qubit

Como já dito anteriormente, o qubit trata-se de um bloco de construção de dispositivos computacionais cuja descrição é dada por um sistema de dois estados. Factualmente, qualquer sistema com um conjunto finito de estados discretos e estáveis, com transições controladas entre si servem. De acordo com a mecânica quântica pode-se afirmar que qualquer sistema desse tipo pode existir em uma superposição de estados. Geralmente, o estado de um qubit, pode ser descrito por

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle. \quad (2.2)$$

• Representação de uma Esfera de Bloch

A fim de se ilustrar geometricamente o estado quântico de um qubit fazemos uso da denominada esfera de Bloch³, sendo esta uma representação geométrica do espaço de estado puro de um

³De um ponto de vista estritamente matemático, cada sistema mecânico quântico está associado a um espaço de Hilbert complexo separável H . Um estado puro de um sistema quântico é representado por um vetor não nulo ψ em $\mathcal{H}$. Como os vetores ψ e $\lambda\psi$ (com $\lambda \in \mathbb{C}^*$) representam o mesmo estado, o nível do sistema quântico corresponde à dimensão do espaço de Hilbert e estados puros podem ser representados como classes de equivalência, ou raios em um espaço de Hilbert projetivo $\mathbb{P}(\mathcal{H}_{\mathbb{C}}^n) = \mathbb{CP}^{n-1}$. Para um espaço de Hilbert bidimensional, o espaço de todos esses estados é a reta projetiva complexa $\mathcal{H}_{\mathbb{C}}^2 = \mathbb{CP}^1$. Esta é a esfera de Bloch, que pode ser mapeada para a esfera de Riemann. Trata-se de uma 2-esfera unitária, com pontos antípodas correspondendo a um par de vetores de estado mutuamente ortogonais. Os polos norte e sul da esfera de Bloch são tipicamente escolhidos para corresponder aos vetores da base padrão, ou seja, $|0\rangle$ e $|1\rangle$, respectivamente, que por sua vez podem corresponder, por exemplo, aos estados de spin-*up* e spin-*down* de um elétron. Essa escolha é arbitrária, no entanto, entretanto, os pontos na superfície da esfera correspondem aos estados puros do sistema, enquanto os pontos internos correspondem aos estados mistos. A esfera de Bloch pode ser generalizada para um sistema quântico de nível n , mas a visualização

sistema mecânico quântico de dois níveis (qubit), esta esfera foi assim denominada em homenagem ao físico Felix Bloch [78], sendo que em algumas obras encontra-se o nome Esfera de Bloch-Poincaré⁴, [79]. A esfera de Bloch-Poincaré pode ser definida da seguinte maneira, seja uma base ortonormal, qualquer estado puro $|\psi\rangle$ de um sistema quântico de dois níveis pode ser escrito como uma superposição dos vetores da base $|0\rangle$ e $|1\rangle$, em que o coeficiente de cada um dos dois vetores da base são números pertencentes ao corpo dos complexos.

Portanto, o estado puro de um qubit trata-se de uma superposição coerente dos estados de base, dessa forma, ψ , poder-se-á ser descrito por uma combinação linear, como a equação (2.2), com α e $\beta \in \mathbb{C}$ tratam-se das amplitudes de probabilidade. Quando faz-se a medida deste qubit na base padrão, de acordo com a regra de Born, a probabilidade do resultado $|0\rangle$ com valor **0** é $|\alpha|^2$ e a probabilidade do resultado $|1\rangle$ com valor **1** é $|\beta|^2$. Sendo que os quadrados absolutos das amplitudes equivalem às probabilidades, segue-se que α e β devem ser restringidos de acordo com o segundo axioma de Kolmogorov, [80], por intermédio da equação

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (2.3)$$

Há a priori a existência de quatro graus de liberdade na equação (2.2), uma vez que tanto em α quanto em $\beta \in \mathbb{C}$ ambos possuem dois graus de liberdade cada, não obstante, um grau de liberdade é pode ser removido pela restrição imposta pela normalização (2.3).

Desta forma, por meio de uma mudança adequada de coordenadas, pode-se eliminar um dos graus de liberdade. Uma escolha possível é a das coordenadas de Hopf [81–83]:

$$\alpha = e^{i\delta} \cos \frac{\theta}{2},$$

$$\beta = e^{i(\delta+\varphi)} \sin \frac{\theta}{2}.$$

Além disso, a fase global do estado $e^{i\delta}$ não tem consequências fisicamente observáveis⁵, desta forma pode-se escolher arbitrariamente $\alpha \in \mathbb{R}$, (ou β no caso de $\alpha = 0$), deixando apenas dois graus de liberdade:

não apresenta uma utilidade. A métrica natural na esfera de Bloch é a métrica de Fubini-Study (A métrica de Fubini-Study trata-se de uma de Kähler em um espaço projetivo complexo $\mathbb{CP}^n$ dotado de uma forma hermitiana. O mapeamento da 3-esfera unitária no espaço de estado bidimensional $\mathbb{C}^2$ para a esfera de Bloch é o fibrado de Hopf, com cada raio de espinores (são elementos de um espaço vetorial complexo que podem ser associados ao espaço euclidiano), mapeando para um ponto na esfera de Bloch.

⁴Por comodidade e sem perda da generalidade denominar-se-á doravante, esfera de Bloch.

⁵Devido à regra de Born, a probabilidade de observar um resultado após a medição é o módulo ao quadrado da amplitude de probabilidade para esse resultado ou estado base, autoestado. O fator de fase global $e^{i\delta}$ não é mensurável, pois se aplica a ambos os estados base e está no círculo unitário complexo, então $|e^{i\delta}|^2 = 1$, note que, ao remover $e^{i\delta}$, estados quânticos com fase global não podem ser representados como pontos na superfície da esfera de Bloch.

$$\alpha = \cos \frac{\theta}{2},$$

$$\beta = e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2}$$

em que $e^{i\varphi}$ é a fase fisicamente significativa⁶.

Sabendo-se que a Esfera de Bloch é *a priori*, uma esfera topológica de 3-dimensional, ($\mathbb{S}^3 \subseteq \mathbb{R}^4$), poder-se-á descrevê-la a partir da redução de um grau de liberdade, como sendo uma esfera topológica de 2-dimensional, ($\mathbb{S}^2 \subseteq \mathbb{R}^3$). Pode-se ainda realizar-se a seguinte identificação $\mathcal{H}_{\mathbb{C}}^2 \stackrel{iso}{\cong} \mathbb{C}^2$, [84], neste caso o Espaço de Hilber complexo 2-dimensional pode ser identificado com o espaço complexo 2-dimensional, [85, 86], têm-se ainda uma outra identificação do espaço complexo 2-dimensional com o espaço euclideano de dimensão 4, como segue a expressão

$$\mathbb{C}^2 \cong \mathbb{R}^4. \quad (2.4)$$

• Estado Puro

Um estado puro é totalmente especificado por $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, , uma superposição coerente, representada por um ponto na superfície da esfera de Bloch, pode ser escrito como um vetor unitário do espaço vetorial $\mathcal{H}_{\mathbb{C}}^2 \stackrel{iso}{\cong} \mathbb{C}^2$.

Um qubit genérico $|\psi\rangle$ é representado pela equação (2.2) em que o conjunto $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ é a base computacional de $\mathbb{C}^2$ e como já dito, os coeficientes $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ são denominadas amplitudes de estado de $|\psi\rangle$. O termo vetor de estado é usado como sinônimo de vetor unitário em um espaço de Hilbert. Isto significa que o estado pode ser descrito por quatro números reais, consoante a expressão (2.4), que identifica o espaço complexo 2-dimensional com o espaço euclideano 4-dimensional, desta forma, a Esfera de Bloch pode ser um mergulho⁷, em um $\mathbb{R}^4$ ou com a redução de um grau de liberdade, como sendo, $\mathbb{R}^3$, como é mais usual, pois, sendo uma 2-esfera, possibilita sua visualização facilitando o entendimento do funcionamento de circuitos quânticos, a operação com portas lógicas quânticas e até mesmo com operações como transformações unitárias, quando no emulador QISKIT.

Não obstante, apenas a fase relativa entre os coeficientes dos dois vetores da base tem algum significado físico, a fase do sistema quântico não é diretamente mensurável, de modo que há por

⁶Em geral a base de Pauli Z é denominada base computacional, em que a fase relativa não tem efeito na medição, sendo que esta na base de Pauli X ou Y dependem da fase relativa. Exemplificando-se $(|0\rangle + e^{i\pi/2}|1\rangle)/\sqrt{2}$, isso porque este estado está no polo positivo do eixo Y na base Y sempre medirá o mesmo valor, enquanto na base Z resulta em igual probabilidade de ser medido para $|0\rangle$ ou $|1\rangle$. Como a medição colapsa o estado quântico, medir o estado em uma base oculta alguns dos valores que teriam sido mensuráveis na outra base.

⁷De forma intuitiva, um mergulho $f : X \rightarrow Y$, sendo X, Y , espaços topológicos, nos permite tratar X como um subespaço de Y . Todo mergulho é injetivo e contínuo.

falta de expressão mais adequada, redundância nesta descrição, que é apresentada. Assim, pode-se pegar o coeficiente de $|0\rangle$ para ser real e não negativo. Deve-se salientar que a coerência é essencial para que um qubit esteja em um estado de superposição, com interações, ruído quântico e decoerência, é possível colocar o qubit em um estado misto, que se trata de uma combinação estatística de diferentes estados puros.

- **Representação Geométrica da Esfera de Bloch em Coordenadas Polares**

Além disso, também sabe-se que por fato egresso da mecânica quântica que a probabilidade total do sistema deve ser 1, de tal maneira que

$$\| |\psi\rangle \|^2 = 1. \quad (2.5)$$

Uma vez introduzida esta restrição, pode-se escrever $|\psi\rangle$ usando a seguinte infra descrita representação:

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2) |0\rangle + e^{i\varphi} \sin(\theta/2) |1\rangle \quad (2.6)$$

onde

$$0 \leq \theta \leq \pi \quad (2.7)$$

e

$$0 \leq \varphi < 2\pi. \quad (2.8)$$

A representação é sempre única, pois, embora o valor de ϕ não seja único quando $|\psi\rangle$ é um dos estados $|0\rangle$ ou $|1\rangle$, o ponto representado por θ e φ é. Na notação acima, o estado $|\psi\rangle$ pode ser representado por um ponto na superfície de uma esfera de raio unitário, denominada esfera de Bloch, conforme figura abaixo.

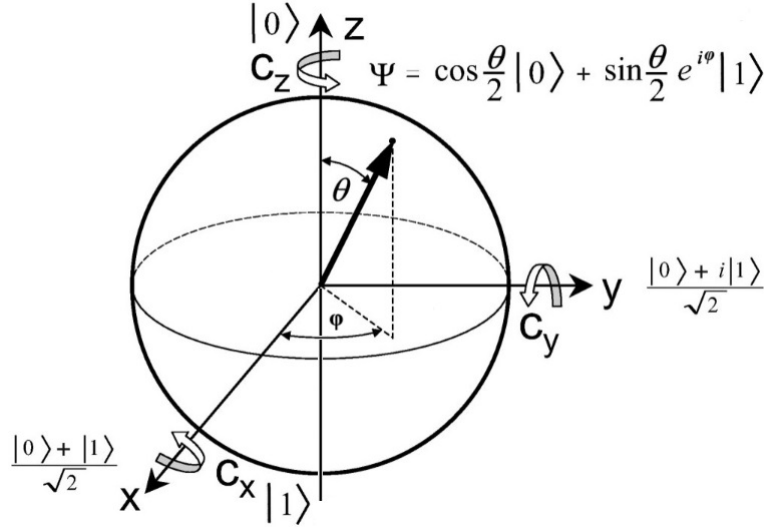


Figura 2.1: Representação da esfera de Bloch com estado do qubit. Fonte: [87]

Como pode-se observar, o estado $|0\rangle$ está no polo norte da esfera, porque é obtido tomando-se $\theta = 0$. Reciprocamente, $|1\rangle$ está no polo sul. Além disso, os estados [9]:

$$|\pm\rangle = \frac{|0\rangle \pm |1\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.9)$$

tratam-se dos pontos de intersecção do eixo x da esfera, e estados

$$|\pm i\rangle = \frac{|0\rangle \pm i|1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (2.10)$$

são os pontos de intersecção do eixo y com a esfera.

• Estados Mistos de um Qubit

Estados mistos, (misturas estatísticas de estados quânticos), podem ser representados por pontos no interior da esfera de Bloch, [88], denotado por $\mathring{\mathbb{S}}^2$, (também denominado bola de Bloch, conforme uso vernáculo em topologia)⁸. Um estado qubit misto tem três graus de liberdade: os ângulos φ e θ , bem como o comprimento r do vetor que representa o estado misto.

Sendo assim, o interior da esfera de Bloch é usado para descrever os estados de um qubit na presença de decoerência [89, 90].

Naturalmente, a representação de bits clássicos na esfera de Bloch é dada pelos polos da esfera e, além disso, um bit no estado 0 com probabilidade p e no estado 1 com probabilidade $1 - p$, pode ser representado por um ponto no eixo z com coordenadas $2p - 1$.

⁸Uma bola unitária (aberta) é definida como sendo a região dentro de uma esfera unitária, o conjunto de pontos de distância menor que 1 do centro.

2.2.4 Vetor de Bloch

Pode-se definir o estado quântico em termos do denominado vetor de Bloch. Neste caso θ, ϕ são ângulos esféricos que definem a localização do estado quântico, sendo esse vetor descrito conforme a figura 2.1 [91]:

$$\begin{bmatrix} \sin\theta \cos\phi \\ \sin\theta \sin\phi \\ \cos\theta \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

Assim, a relação entre as coordenadas polares em $\mathbb{S}^2$ (esfera unitária 2-dimensional), e as coordenadas cartesianas em $\mathbb{R}^3$ é [92]:

$$(\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta) = (x, y, z) = \vec{r}, \quad (2.12)$$

onde $\vec{r}$ denomina-se vetor de Bloch.

2.3 Sistemas compostos

A fim de descrevermos sistemas com mais de um qubit fazemos uso das operações de produto tensorial. Abaixo apresentamos o formalismo matemático do produto tensorial e representação matemática de dois sistemas quânticos.

2.3.1 Produto Tensorial

Considerando-se dois espaços vetoriais V e W , o seu produto tensorial $V \otimes W$, sobre um mesmo corpo arbitrário $\mathbb{K}$, trata-se de um espaço vetorial ao qual está associado um mapa bilinear que leva o par

$$V \times W \rightarrow V \otimes W. \quad (2.13)$$

Sendo (v, w) , $v \in V, w \in W$ para um elemento de $V \otimes W$, denotar-se-á doravante por $v \otimes w$. Um elemento da forma $v \otimes w$ denomina-se produto tensorial de v e w . Se as bases são dadas para V e W , uma base de $V \otimes W$ é formada por todos os produtos tensoriais de um elemento da base de V e um elemento da base de W [93, 94].

Definição 2.3.1 (Produto Tensorial de Espaços Vetoriais). *Trata-se de um objeto matemático que possui as propriedades seguintes , [65, 93, 95, 96]:*

Sejam V e W dois espaços $\mathbb{K}$ -vetoriais finitos, com suas respectivas bases que denominar-se-á doravante por $\mathbb{B}_V$ e $\mathbb{B}_W$, sendo

$$\mathbb{B}_V = v_1, \dots, v_n \text{ e } \mathbb{B}_W = w_1, \dots, w_m, \text{ com } \{m, n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\}, \quad (2.14)$$

respectivamente.

O produto tensorial de V e W sobre um corpo arbitrário $\mathbb{K}$ é por definição

$$V \otimes W \quad (2.15)$$

cuja dimensão é dada por $(m \cdot n)$ – dimensional cuja denotação segue abaixo:

$$\mathbb{B}_V \otimes \mathbb{B}_W = \{v_i \otimes v_j \mid 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m\}. \quad (2.16)$$

2.3.1.1 Propriedades do Produto Tensorial

Propriedade 1. (Dimensão): Se V e W são espaços vetoriais de dimensão finita, então $V \otimes W$ tem dimensão finita e sua dimensão é o produto de suas dimensões;

Propriedade 2. (Associatividade): O produto tensorial é associativo no sentido de que, dados três espaços vetoriais $\{U, V, W\}$, existe um isomorfismo canônico:

$$(U \otimes V) \otimes W \stackrel{iso}{\cong} U \otimes (V \otimes W), \quad (2.17)$$

que leva $(u \otimes v) \otimes w$ para $u \otimes (v \otimes w)$. Isso permite omitir parênteses no produto tensorial de mais de dois espaços vetoriais ou vetores.

Propriedade 3. (Comutatividade como operações em um espaço vetorial): O produto tensorial de dois espaços vetoriais V e W é comutativo no sentido de que existe um isomorfismo canônico:

$$V \otimes W \stackrel{iso}{\cong} W \otimes V, \quad (2.18)$$

que leva $v \otimes w$ para $w \otimes v$. Isso resulta do fato de que uma base de $V \otimes W$ é formada tomando todos os produtos tensoriais de um elemento de base de V e um elemento de base de W . Isso fornece permissividade para omitir parênteses no produto tensorial de mais de

dois espaços vetoriais ou vetores. Por outro lado, mesmo quando $V = W$, o produto tensorial de vetores não é comutativo, isso, é, em geral

$$v \otimes w \neq w \otimes v. \quad (2.19)$$

O isomorfismo linear $V^{\otimes n} \rightarrow V^{\otimes n}$, também é utilizado para representar o produto tensorial de n cópias do espaço vetorial V .

2.3.2 Sistema quânticos múltiplos

Quando dois sistemas quânticos diferentes são considerados em conjunto, o espaço de Hilbert do sistema combinado é o produto tensorial dos espaços de Hilbert dos dois componentes. Por exemplo, sejam A e B dois sistemas quânticos, com espaços de Hilbert $\mathcal{H}_A$ e $\mathcal{H}_B$, respectivamente. O espaço de Hilbert do sistema composto é então $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, [97]. Se o estado do primeiro sistema for o vetor ψ_A e o estado do segundo sistema for ψ_B , então o estado do sistema composto é $\psi_A \otimes \psi_B$.

Nem todos os estados no espaço conjunto de Hilbert $\mathcal{H}_{AB}$ podem ser escritos nesta forma, entretanto, porque o princípio da superposição implica que combinações lineares desses estados *separáveis* ou *produtos* também são válidos. Por exemplo, se ψ_A e ϕ_A são ambos estados possíveis para o sistema A , e da mesma forma ψ_B e ϕ_B são ambos estados possíveis para o sistema B , então

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_A \otimes \psi_B + \phi_A \otimes \phi_B) \quad (2.20)$$

pode ser um estado conjunto válido que não é separável. Estados que não são separáveis são denominado de emaranhados, [9, 98–100].

2.4 Excertos de Mecânica Quântica

2.4.1 Breve descrição Histórica

A mecânica quântica tem o condão de descrever muitos sistemas que a física clássica não tem. Em suma, pode a física clássica descrever muitos aspectos em macro escala e em até um certo limite, em uma escala microscópica, não sendo suficiente para descrever em escala atômica e subatômicas. A maioria das teorias da física clássica pode ser derivada da mecânica quântica

como uma aproximação válida em grande escala, [101].

Os sistemas quânticos têm estados vinculados que são quantizados em valores discretos de energia, momento, momento angular e outras quantidades, em contraste com os sistemas clássicos onde essas quantidades podem ser medidas continuamente.

As medições de sistemas quânticos mostram características de partículas e ondas (dualidade onda-partícula), [102], e há limites para a precisão com que o valor de uma quantidade física pode ser previsto antes de sua medição, dado um conjunto completo de condições iniciais (o princípio da incerteza). O surgimento como ramo da física deu-se de maneira gradual, tendo como ponto de partida teorias para explicar observações que não podiam ser conciliadas com a física clássica, um exemplo é a solução proposta por Max Planck em 1900 para o problema da radiação do corpo negro, e a correspondência entre energia e frequência no artigo de Albert Einstein de 1905, o efeito fotoelétrico. Estas primeiras tentativas de compreender os fenômenos microscópicos, essas novas concepções levaram ao pleno desenvolvimento da mecânica quântica em meados da década de 1920, que foi levado a cabo por cientista como Niels Bohr, Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Max Born, Paul Dirac, entre outros.

A descrição teórica utilizada atualmente, é formulada sob a égide de formalismos matemáticos especialmente desenvolvidos. Em um deles, uma entidade matemática denominada função de onda, que fornece informações, na forma de amplitudes de probabilidade, sobre quais medições da energia, momento e outras propriedades físicas de uma partícula podem produzir, [103].

2.4.2 Formalismo Matemático

Matematicamente a descrição de um estado de um sistema da mecânica quântica é um vetor ψ pertencente a um espaço de Hilbert complexo, denotado como em (2.1.1). Postula-se que este vetor é normalizado sob o produto interno do espaço de Hilbert, ou seja, obedece a seguinte equação [9]

$$\langle \psi, \psi \rangle = 1. \quad (2.21)$$

Este estado é bem definido a menos de um número complexo de módulo 1, a fase global, ou seja, ψ e $e^{i\alpha}\psi$ representam o mesmo sistema físico, [104].

Pode-se dizer que os estados possíveis são pontos em um espaço projetivo de um espaço de Hilbert, denominado de espaço projetivo complexo. Quantidades físicas de interesse, como por exemplo, posição, momento, energia, spin, são representadas por observáveis, que são operadores lineares hermitianos autoadjuntos que atuam no espaço de Hilbert. Em geral, um estado quântico

será uma combinação linear dos autoestados, denominada superposição quântica. Quando um observável, [105], é medido, o resultado será um de seus autovalores com probabilidade dada pela regra de Born, no caso mais trivial, o autovalor λ é não degenerado e a probabilidade é dada por $|\langle \vec{\lambda} | \psi \rangle|^2$, em que $\vec{\lambda}$ é seu autovetor associado. Nos casos degenerados, por sua vez, a probabilidade é dada por $\langle \psi | P_\lambda | \psi \rangle$, em que P_λ é o projetor em seu autoespaço associado. No caso contínuo, estas fórmulas fornecem, em vez disso, a densidade de probabilidade.

Posteriormente à medição, se o resultado λ for obtido, postula-se que o estado quântico entrará em colapso para $\vec{\lambda}$, no caso não degenerado, ou para $P_\lambda \psi / \sqrt{\langle \psi | P_\lambda | \psi \rangle}$, no caso geral. A natureza probabilística da mecânica quântica decorre, portanto, do ato de medição [106], [107].

2.5 Dinâmica Unitária

Agora que cobrimos os conceitos fundamentais da computação quântica, incluindo a introdução do qubit, o postulado da medição e a extensão para sistemas compostos, nesta seção, vamos explorar o conceito de dinâmica unitária. A dinâmica unitária descreve como manipular os estados quânticos de maneira controlada, sendo essencial para o desenvolvimento da computação quântica. A partir dessas dinâmicas, definiremos as operações lógicas quânticas, que serão cruciais para nosso estudo.

2.5.1 Propriedades de uma Transformação Unitária

O prelúdio desta subseção exige algumas definições *a priori*, pois serão de necessidade para a continuidade dos temas que se discorrerá adiante, portanto, seguem abaixo algumas definições e conceitos para o desenvolvimento do formalismo matemático, [108].

- **Operador Unitário:** Segue abaixo a definição formal:

Definição 2.5.1 (Operador Identidade). *Denotado por I , é o operador em V sobre um corpo K tal que, [109]*

$$Iv = v, \forall v \in V. \quad (2.22)$$

- **Transformação Unitária:** Trata-se de um isomorfismo linear que preserva o produto interno, em outras palavras, o produto interno de dois vetores antes da transformação é igual ao mesmo após a transformação, esta é uma definição mais intuitiva, de uma maneira mais formal pode-se inserir a seguinte definição, [108]:

Definição 2.5.2 (Transformação Unitária). *Uma transformação unitária é um isomorfismo isométrico entre dois espaços de produtos internos, tal qual um espaços de Hilbert, pode-se dizer também que uma transformação unitária é uma bijeção, [110], [111]*

$$U : H_1 \rightarrow H_2 \quad (2.23)$$

Entre dois espaços munidos de produto interno, H_1 e H_2 , tal que

$$\langle Ux, Uy \rangle_{H_2} = \langle x, y \rangle_{H_1} \quad \forall x, y \in H_1. \quad (2.24)$$

Trata-se de uma isometria linear, uma vez que

$$x = y. \quad (2.25)$$

Observação 2.5.1. *Em particular $\mathcal{H}_1 = H_1$ e $\mathcal{H}_2 = H_2$ na supra citada definição (2.2).*

- **Operador Unitário:** Utilizando-se de um formalismo egresso da análise funcional, denota-se um operador unitário, como sendo um sobrejetivo, limitado em um espaço de Hilbert que preserva o produto interno, em geral esse tipo de operador atua em um espaço de Hilbert. De uma maneira mais formal, [112]:

Definição 2.5.3 (Operador Unitário). *Define-se como sendo um operador linear limitado.*

$$U : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad (2.26)$$

que satisfaz

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I \quad (2.27)$$

Em que $U^\dagger$ é o adjunto de U , e

$$I : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad (2.28)$$

Em que I , denota na equação (2.28), o operador identidade, vide definição (2.5.3). Relativamente às duas condições mais fracas denotadas respectivamente por $U^\dagger U = I$ e $UU^\dagger = I$ definem nesta ordem, uma isometria e uma coisometria. Assim, um operador unitário é um operador linear

limitado que é concomitantemente uma isometria e uma coisometria, é análogo dizer que trata-se de uma isometria sobrejetiva vide observação (2.5.1).

Definição 2.5.4. *Seja A uma álgebra C^* unitária, então um elemento $u \in A$ denomina-se de co-isometria se $uu^* = 1$, [113].*

Seja U uma transformação unitária, a mesma possui as propriedades seguintes [114]:

Propriedade 1. As linhas de U formam uma base ortonormal;

Propriedade 2. As colunas de U formam uma base ortonormal.

Propriedade 3. U preserva produtos internos, da forma seguinte:

$$\langle v|w \rangle = (U|v\rangle)^\dagger U|w\rangle = \langle v|U^\dagger U|w\rangle = \langle v|w\rangle;$$

Propriedade 4. U pode ser diagonalizável.

$$\begin{bmatrix} e^{i\theta_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{i\theta_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 \dots & \dots & e^{i\theta_n} \end{bmatrix}$$

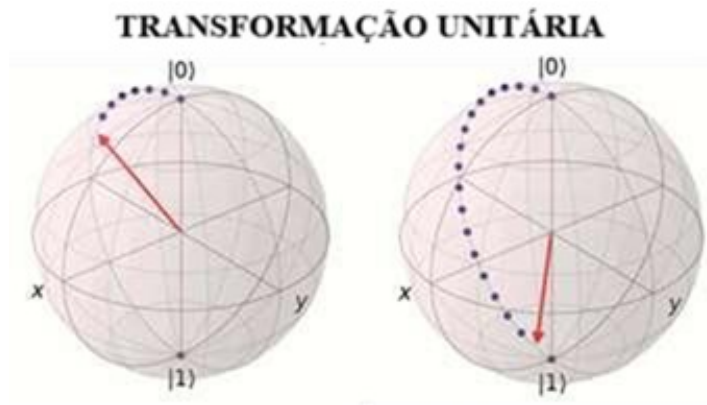


Figura 2.2: Um caso particular de transformação unitária com representada na esfera de Bloch.

Fonte: Autor

2.5.2 Equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger tem relação com a questão da evolução do tempo. Como leciona [114], é a equação do movimento que descreve a evolução no tempo do estado quântico

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H|\Psi\rangle. \quad (2.29)$$

Na equação (2.29), $\hbar$ é uma constante denominada constante de Planck reduzida, H é denominado Hamiltoniano e tem um conjunto ortonormal de autovetores $|\Psi_i\rangle$, com todos os autovalores reais $\lambda_i : H|\phi_i\rangle = \lambda_i|\phi_i\rangle$. Observando-se a equação de Schrödinger (2.29), a restrição de unitariedade nas portas quânticas é simplesmente a versão discreta no tempo da restrição de que o hamiltoniano é hermitiano. De fato, dado um operador hermitiano A , então

$$U = e^{iA} \quad (2.30)$$

que segue da álgebra matricial, [114], [115]

$$U^\dagger = e^{-iA^\dagger} = e^{-iA} \quad (2.31)$$

e portanto $UU^\dagger = 1$.

Dar-se-á a prova explícita que se o sistema satisfaz a equação de Schrödinger, então a sua evolução em tempo discreto é descrita por um operador unitário, (o operador de evolução temporal é um exemplo de operador unitário), e determinar-se-á este operador em termos dos autovalores de H . Para tanto, assumir-se-á que H é independente do tempo. Seja $|\Psi(t)\rangle$ na base dos autovetores de H [102], [114]:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j a_j(t)|\phi_j\rangle \Rightarrow \quad (2.32)$$

$$i\hbar \frac{d \sum_j a_j(t)|\phi_j\rangle}{dt} = H \sum_j a_j(t)|\phi_j\rangle \quad (2.33)$$

$$= \sum_j a_j(t)\lambda_j|\phi_j\rangle \Rightarrow \quad (2.34)$$

$$i\hbar \frac{da_j(t)}{dt} = \lambda_j a_j(t) \Rightarrow \quad (2.35)$$

$$a_j(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_j t} a_j(0) \Rightarrow \quad (2.36)$$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_j t} a_j(0) |\phi_j\rangle \quad (2.37)$$

Desta forma, pode-se concluir que a mudança após uma diferença de tempo discreta é unitária, [114]:

$$\begin{bmatrix} e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_1^t} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_2^t} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda_n^t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}. \quad (2.38)$$

2.6 Conclusões e Síntese do Capítulo 2

O Capítulo 2 traz os fundamentos da computação quântica, faz menção aos formalismos matemáticos como os produtos tensoriais, a formalismos físicos como a dinâmica unitária, a equação de Schrödinger, conceitos fundamentais tanto para a mecânica quântica, quanto para a computação quântica.

Elenca a esfera de Bloch como elemento fundamental neste processo, faz menções lacônicas sobre sua natureza topológica, que serve para descrever os qubits em sua expressão geométrica, (quanto a outras propriedades desta esfera, deixamos uma descrição mais completa nos apêndices *E* e *G*, que discorrem de uma forma mais sofisticada sobre a natureza da esfera de Bloch⁹). Uma vez tomando-se conhecimentos destes elementos, é agora possível entender o conceito que será trazido no próximo capítulo que diz respeito à Portas e Circuitos Quânticos, que fazem vasto uso, destes conceitos, em particular dos espaços de Hilbert, também das esferas de Bloch.

⁹Os conceitos sobre os quais discorreremos nos apêndices citados dizem respeito à natureza topológica, também se traz uma nova denominação para a esfera, uma variedade topológica, que possui uma estrutura adicional que lhe confere a diferenciabilidade. Além disso, discorreremos também sobre projeção estereográfica e também sobre o fibrado de Hopf, cuja importância para o entendimento da esfera de Bloch é seminal. Note-se que a esfera de Bloch é representada como uma superfície bidimensional, não obstante, pode ser descrita como uma 3-esfera. Também qualificamos a esfera de Bloch como sendo uma das 8 geometrias de Thurston, fato não tão óbvio, mas, que possui relevância para trabalhos outros em computação quântica.

Capítulo 3

Portas e Circuitos Quânticos

A notação utilizada hodiernamente para portas quânticas fora desenvolvida por muitos dos fundadores da ciência da informação quântica, sob a égide da notação introduzida por Richard Feynman em 1986, [23], podem-se citar nomes como de Adriano Barenco, Charles Bennett, Richard Cleve, David P. DiVincenzo, Norman Margolus, Peter Shor, Tycho Sleator, John A. Smolin e Harald Weinfurter, [116]. Há vários tipos de operações físicas que podem ser realizadas com qubits. Nesta secção se discorrerá à guisa de uma introdução às portas lógicas quânticas, que são por assim dizer, os blocos de construção de um circuito quântico em um computador quântico [116], [9].

3.1 Operações com Qubits

Como já fora visto na Secção (2.5.1), matematicamente, os qubits passam por uma transformação unitária, que é reversível, descrita pela multiplicação da matriz unitária das portas quânticas pelo vetor de estado quântico, sendo o resultado desta multiplicação um novo estado quântico. Quanto à medição quântica, trata-se de uma operação irreversível na qual são obtidas informações sobre o estado de um único qubit e a coerência é perdida. A inicialização ou re-inicialização de um qubit pode ser efetuada exatamente como na medição. A medição na base computacional pode resultar em $|0\rangle$ e, caso o resultado da medição seja $|1\rangle$, pode ser inicializado seguido pela aplicação da porta Pauli-X, (para maiores detalhes vide subsecção (3.2.1.3)). Como já dito, representa-se as portas lógicas quânticas por matrizes unitárias. Uma porta que atua em n qubits é representada por uma matriz unitária da forma $2^n \times 2^n$, [9] e o conjunto de todas essas portas com o grupo operação de multiplicação de matrizes, que é um grupo de Lie, o grupo unitário $U(2^n)$. O estado quântico afirma que as portas atuam sobre vetores unitários em 2^n dimensões complexas, com a norma euclidiana complexa (a norma 2), [9].

As portas quânticas mais comuns operam em espaços vetoriais de um ou dois qubits, assim como as portas lógicas clássicas operam em um ou dois bits, [9].

Abaixo na secção (3.2), iremos apresentar uma série de operações lógicas, suas representações matriciais e seus símbolos.

3.2 Exemplos de Portas Lógicas Quânticas

3.2.1 Portas lógicas de 1 qubit

3.2.1.1 Porta Identidade

Trata-se de uma matriz de identidade, é definida para um único qubit como, [117], [118]

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.1)$$

A porta I é independente da base e não modifica o estado quântico, esta porta é útil ao descrever-se matematicamente o resultado de várias operações de portas ou ao se discorrer sobre circuitos multi-qubits. O seu símbolo em circuitos quânticos é dado por

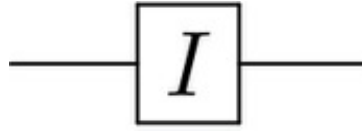


Figura 3.1: Símbolo da Porta Lógica Identidade. Fonte: Autor

3.2.1.2 Porta de Hadamard

A porta de Hadamard ou Walsh-Hadamard, nome dado em homenagem ao cientista francês Jacques Hadamard e Joseph L. Walsh, atua em um único qubit, [119]. Os dois estados $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$ e $(|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ são denotados as vezes por $|+\rangle$ e $|-\rangle$, respectivamente. A porta Hadamard realiza uma rotação π em torno do eixo $(\hat{x} + \hat{z})/\sqrt{2}$ na esfera de Bloch¹ e portanto, é involutória, representada pela matriz de Hadamard² [9].

¹É possível encontrar-se esta notação para os eixos na Esfera de Bloch, ao invés de x, y, z .

²Esta matriz também é utilizada em Wavelets, servindo de filtro para sinais.

- **Representação na Forma Matricial**

Representa-se pela matriz de Hadamard [9]:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}. \quad (3.2)$$

- **Atuação na Base Computacional**

$$|0\rangle \mapsto \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.3)$$

e

$$|1\rangle \mapsto \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad (3.4)$$

Neste sentido, a porta Hadamard é usada para realizar uma mudança de base, invertendo $\hat{x}$ e $\hat{z}$. O seu símbolo em circuitos quânticos é dado por



Figura 3.2: Símbolo da Porta Lógica de Hadamard. Fonte: Autor

3.2.1.3 Portas X, Y, Z

As portas lógicas X , Y e Z são representadas matricialmente pelas matrizes de Pauli (X, Y, Z) e equivalem, respectivamente, a uma rotação em torno dos eixos (x, y, z) da esfera de Bloch em π rad. A porta Pauli- X é o equivalente quântico da porta NOT para computadores clássicos em relação à base padrão $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ e, em alguns livros e artigos, encontra-se também a denominação de *bit-flip*, pois leva $|0\rangle$ para $|1\rangle$ e $|1\rangle$ para $|0\rangle$. Da mesma forma, Pauli- Y leva de $|0\rangle$ para $i|1\rangle$ e $|1\rangle$ para $-i|0\rangle$. Quanto à Pauli- Z deixa o estado base inalterado $|0\rangle$, o mapa leva de $|1\rangle$ a $-|1\rangle$. Devido a esta característica, Pauli- Z é denominado inversão de fase. Como dito, matricialmente elas são dadas pelas matrizes de Pauli, que seguem infra descritas, [118]:

- Atuação na Base Computacional e Representação Matricial

$$\begin{aligned}
 X = \text{NOT} = \sigma_x &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, & |0\rangle \mapsto |1\rangle, & |1\rangle \mapsto |0\rangle, \\
 Y = \sigma_y &= \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, & |0\rangle \mapsto i|1\rangle, & |1\rangle \mapsto -i|0\rangle, \\
 Z = \sigma_z &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, & |0\rangle \mapsto |0\rangle, & |1\rangle \mapsto -|1\rangle.
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Seus símbolos em circuitos quânticos são dados por:

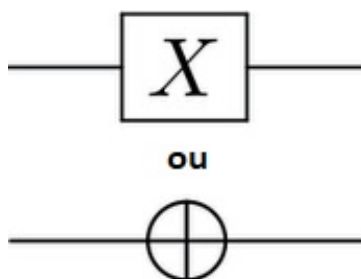


Figura 3.3: Símbolo da Porta Lógica X. Fonte: Autor

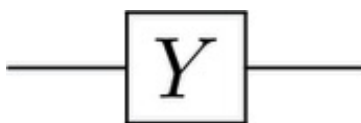


Figura 3.4: Símbolo da Porta Lógica Y. Fonte: Autor



Figura 3.5: Símbolo da Porta Lógica Z. Fonte: Autor

3.2.1.4 Porta Lógica P

- Representação Matricial

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & e^{i\theta} \end{bmatrix} \tag{3.6}$$

- Atuação na Base Computacional

Esta porta leva os estados da base $|1\rangle$ para $e^{i\theta}|1\rangle$ e $|0\rangle$ para $|0\rangle$.

- **Explicitação da dependência de P em relação à θ Exemplos**

$$P(\theta = \pi) = Z \quad (3.7)$$

$$P(\theta = \pi/2) = S \quad (3.8)$$

$$P(\theta = \pi/4) = T \quad (3.9)$$

3.2.1.5 Porta Lógica T

- **Representação Matricial**

A porta T , também conhecida como porta $\pi/8$. Matematicamente, a porta T é representada pela matriz:

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

Como pode-se ver, para o estado $|0\rangle$, a porta T não faz nenhuma alteração. No entanto, para o estado $|1\rangle$, a porta T aplica uma fase de $\pi/8$ ou $e^{i\pi/4}$. A porta T é essencial para várias operações em computação quântica, especialmente porque, junto com as portas Hadamard e CNOT (que veremos abaixo), forma um conjunto universal de portas quânticas, [120].

- **Atuação na Base Computacional**

$$T|0\rangle = |0\rangle, T|1\rangle = e^{i\pi/4}|1\rangle$$

Isso significa que qualquer operação quântica pode ser decomposta usando apenas essas portas. Seus símbolos em circuitos quânticos é dado por:

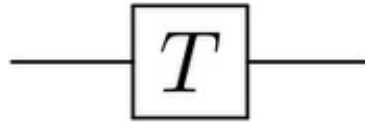


Figura 3.6: Símbolo da Porta Lógica T. Fonte: Autor

3.2.1.6 Porta Lógica S

- **Representação Matricial**

A porta S , também denominada de fase, é definida por uma operação de qubit único definida por, [118]:

$$S = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

A porta S ainda é conhecida por outras denominações devido às suas propriedades, pode se encontrar na literatura o nome porta de fase ou ainda $Z90$, porque representa uma rotação de π rad em torno do

eixo Z . Como pode-se notar, a porta S é simplesmente a porta T aplicada duas vezes, [118]:

$$T^2 = S. \quad (3.12)$$

- **Atuação na Base Computacional**

$$S|0\rangle = |0\rangle, S|1\rangle = i|1\rangle$$

Seu símbolo em circuitos quânticos é dados por:

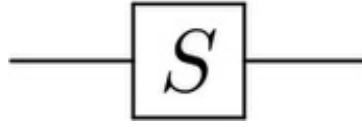


Figura 3.7: Símbolo da Porta Lógica S . Fonte: Autor

3.2.1.7 Rotações Arbitrárias R_x , R_y e R_z

- **Fórmula de Euler**

Pode-se *à priori* girar o vetor de Bloch em qualquer ângulo em torno do eixo correspondente da esfera de Bloch com as portas dos operadores de rotação, R_x , R_y e R_z [121], [117]. Estas portas são formadas tomando potências dos operadores de Pauli. Para tanto, utilizar-se-á a fórmula de Euler, [122], [121]:

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \quad (3.13)$$

de forma que , considerando o operador $A^2 = I$, então

$$e^{i\theta A} = \cos(\theta)I + i\sin(\theta)A. \quad (3.14)$$

A equação (3.14), trata-se de uma generalização da fórmula usual de Euler (3.13). Em que se expande a exponencial como uma série de potências e reuni-se as potências pares no termo cosseno, e as potências ímpares no termo seno.

Pode-se deduzir a equação (3.14), fazendo-se uso de (3.13):

$$e^{i\theta A} = I + i\theta A - \frac{\theta^2}{2!} I - i\frac{\theta^3}{3!} A - i\frac{\theta^4}{4!} I - i\frac{\theta^5}{5!} A + \dots \quad (3.15)$$

da expressão (3.15) faz-se uma manipulação algébrica separando-se as potências pares das ímpares, motivo que dar-se-á justificativa, então segue, [93]:

$$e^{i\theta A} = \underbrace{\left(1 - \frac{\theta^2}{2!} + \frac{\theta^4}{4!} - \dots\right)}_{par} I + \underbrace{\left(\theta - \frac{\theta^3}{3!} + \frac{\theta^5}{5!} - \dots\right)}_{ímpar} A \quad (3.16)$$

- **Porta $R_x(\theta)$**

A porta $R_x(\theta)$ é uma rotação ao redor do eixo x da esfera de Bloch por um ângulo θ . Ela pode ser expressa em termos do operador de Pauli σ_x como:

$$R_x(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_x} \quad (3.17)$$

- **Representação Matricial**

É dada da forma que segue

$$R_x(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\frac{1}{2}\theta) & -i\sin(\frac{1}{2}\theta) \\ -i\sin(\frac{1}{2}\theta) & \cos(\frac{1}{2}\theta) \end{bmatrix}. \quad (3.18)$$

Seu símbolo em circuitos quânticos é dados por:

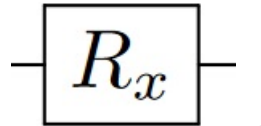


Figura 3.8: Símbolo da Porta Lógica R_x . Fonte: Autor

- **Porta R_y**

De forma análoga pode-se definir a porta R_y . A porta $R_y(\theta)$ é uma rotação ao redor do eixo y da esfera de Bloch por um ângulo θ . Assim como a porta R_x , ela pode ser expressa em termos

do operador de Pauli σ_y como:

$$R_y(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_y} \quad (3.19)$$

- **Representação Matricial**

Sendo descrita da forma dada por

$$R_y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(\frac{1}{2}\theta) & -\sin(\frac{1}{2}\theta) \\ \sin(\frac{1}{2}\theta) & \cos(\frac{1}{2}\theta) \end{bmatrix}. \quad (3.20)$$

Seu símbolo em circuitos quânticos é dados por:

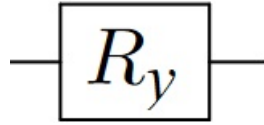


Figura 3.9: Símbolo da Porta Lógica R_y . Fonte: Autor

- **Porta R_z**

Finalmente, pode-se definir a porta R_z . Como a porta R_x e R_y , a porta $R_z(\theta)$ é uma rotação ao redor do eixo z da esfera de Bloch por um ângulo θ . Assim, ela pode ser expressa em termos do operador de Pauli σ_z como:

$$R_z(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_z} \quad (3.21)$$

- **Representação Matricial**

A porta Lógica R_z figura como

$$\begin{bmatrix} e^{-i\frac{1}{2}\theta} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{1}{2}\theta} \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

e seu símbolo em circuitos quânticos é dados por:

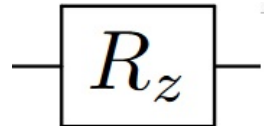


Figura 3.10: Símbolo da Porta Lógica R_z . Fonte: Autor

3.2.1.8 Porta Lógica $R_{\vec{n}}$

Essa porta, realiza uma rotação de θrad no sentido anti-horário em torno de um eixo arbitrário na esfera de Bloch. Em sua forma matricial tem-se que, [121]:

$$R_{\vec{n}} = e^{-i\frac{1}{2}\theta(n_xX+n_yY+n_zZ)} = \cos(\frac{1}{2}\theta)I - i\sin(\frac{1}{2}\theta)(n_xX + n_yY + n_zZ) \quad (3.23)$$

• Representação Matricial

De (3.23), tem-se que sua forma matricial é dada por [121]:

$$\begin{bmatrix} \cos(\frac{1}{2}\theta) - in_z \sin(\frac{1}{2}\theta) & -n_y \sin(\frac{1}{2}\theta) - in_x \sin(\frac{1}{2}\theta) \\ n_y \sin(\frac{1}{2}\theta) - in_x \sin(\frac{1}{2}\theta) & \cos(\frac{1}{2}\theta) + in_z \sin(\frac{1}{2}\theta) \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

e seu símbolo em circuitos quânticos é:

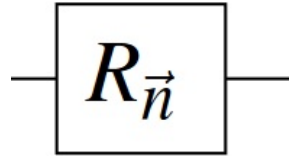


Figura 3.11: Símbolo da Porta Lógica $R_{\vec{n}}$. Fonte: Autor

3.2.2 Portas Lógicas de 2 Qubits

As portas lógicas de 2 qubits são operações quânticas que atuam em dois qubits simultaneamente, permitindo a criação de emaranhamento e outras correlações quânticas essenciais para a computação quântica. Essas portas são fundamentais para a implementação de algoritmos quânticos complexos e para a realização de operações lógicas que não podem ser feitas com portas de qubit único. Abaixo iremos apresentar as portas CNOT, CZ, SWAP e R_{ZZ} .

3.2.2.1 Porta CNOT

Esta porta lógica quântica é importante pois pode-se utilizá-la para emaranhar e desemaranhar estados de Bell, [123]. Além disso, qualquer circuito quântico pode ser simulado com um grau arbitrário de precisão usando-se uma combinação de portas CNOT e rotações de qubit único [116]. Em algumas obras, encontra-se nomes distintos para esta porta, em particular, um se destaca, portas de Feynman, isso ocorre, porque foi o cientista que desenvolveu uma notação inicial para diagramas de portas quânticas em 1985, [124]. A porta CNOT opera em um registro quântico

composto por 2 qubits, invertendo o segundo qubit, o denominado qubit alvo, se e somente se, o primeiro qubit, o que se denomina qubit de controle for $|1\rangle$, [125].

- **Representação na Forma Matricial**

A ação da porta CNOT pode ser representada em forma matricial, em particular na forma de uma matriz de permutação:

$$\text{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.25)$$

- **A tabela verdade**

Antes		Depois	
Controle	Alvo	Controle	Alvo
$ 0\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\rangle$
$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$
$ 1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$
$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ 1\rangle$	$ 0\rangle$

Figura 3.12: Tabela Controle-Alvo. Fonte: Autor

- **Atuação na Base Computacional**

Se $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, são os únicos valores de entrada permitidos para ambos os qubits, então a saída ALVO da porta CNOT corresponde ao resultado de uma porta XOR clássica. Em uma situação de maior generalidade, as entradas podem ser uma superposição linear de forma que porta CNOT transforma o estado quântico:

$$a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle \quad (3.26)$$

em:

$$a|00\rangle + b|01\rangle + c|11\rangle + d|10\rangle. \quad (3.27)$$

Sua representação em um circuito quântico é dada por:

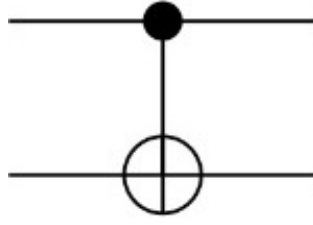


Figura 3.13: Símbolo da Porta Lógica CNOT. Fonte: Autor

3.2.2.2 Porta Controlada-Z

A porta Controlada-Z, também denominada CZ é uma porta de dois qubits. Opera em um par de qubits, sendo que um atua como controle e o outro como alvo.

Em suma, a porta CZ aplica uma inversão de fase ao qubit alvo somente quando o qubit de controle está no estado $|1\rangle$. Se reciprocamente o qubit de controle estiver no estado $|0\rangle$, a porta CZ não afeta o qubit alvo.

- **Atuação na Base Computacional**

Uma explicação de como a porta CZ funciona: Se o qubit de controle estiver no estado $|0\rangle$, a porta não executa nada com nenhum dos qubits, permanecendo ambos em seus estados originais. Se o qubit de controle estiver no estado $|1\rangle$, a porta aplica uma inversão de fase, fazendo uso da porta Pauli-Z ao qubit alvo. Em suma: $CZ|00\rangle = |00\rangle$, $CZ|01\rangle = |01\rangle$, além de $CZ|10\rangle = |10\rangle$.

- **A representação Matricial**

$$CZ = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

Sua representação em um circuito quântico é dada por:

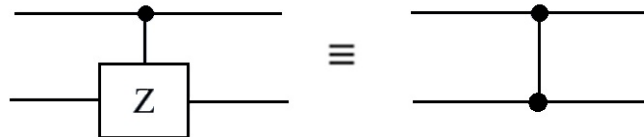


Figura 3.14: Símbolo da Porta Lógica Controlada-Z. Fonte: Autor

3.2.2.3 Porta Swap

- A representação Matricial

Será definida por:

$$\text{SWAP} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

- Atuação na Base Computacional

A porta SWAP é uma porta simétrica e seu papel é o de trocar dois qubits, com respeito às bases

$$|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle \quad (3.30)$$

Em outras palavras, a porta é equivalente a uma troca de estado entre o primeiro e segundo qubit

$$|a, b\rangle \rightarrow |b, a\rangle. \quad (3.31)$$

e a mesma pode ser decomposta da forma que segue

$$\text{SWAP} = \frac{I \otimes I + X \otimes X + Y \otimes Y + Z \otimes Z}{2} \quad (3.32)$$

No circuito quântico a mesma é expressa pelo símbolo

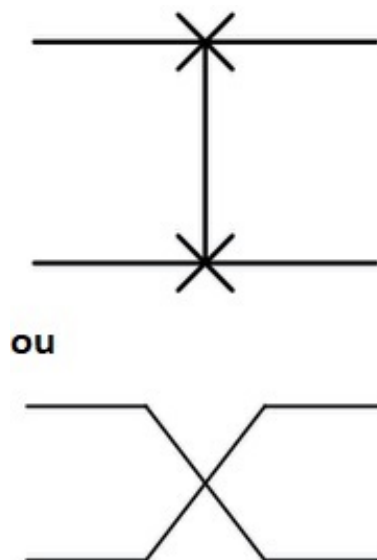


Figura 3.15: Símbolo da Porta Lógica SWAP. Fonte: Autor

A porta SWAP é importante pois permite a reordenação dos qubits em um circuito quântico, facilitando a interação entre qubits que não são adjacentes em arquiteturas de hardware com conectividade limitada.

3.2.2.4 Porta RZZ

- Representação Matricial

Trata-se de uma interação paramétrica $Z \otimes Z$ de 2 qubits, também conhecida como rotação sobre ZZ . Esta porta é simétrica e sua representação matricial é dada por:

$$R_{ZZ}(\theta) = \exp\left(-i\frac{\theta}{2}Z \otimes Z\right) = \begin{bmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\frac{\theta}{2}} \end{bmatrix}. \quad (3.33)$$

No circuito quântico, esta porta é expressa pelo símbolo:

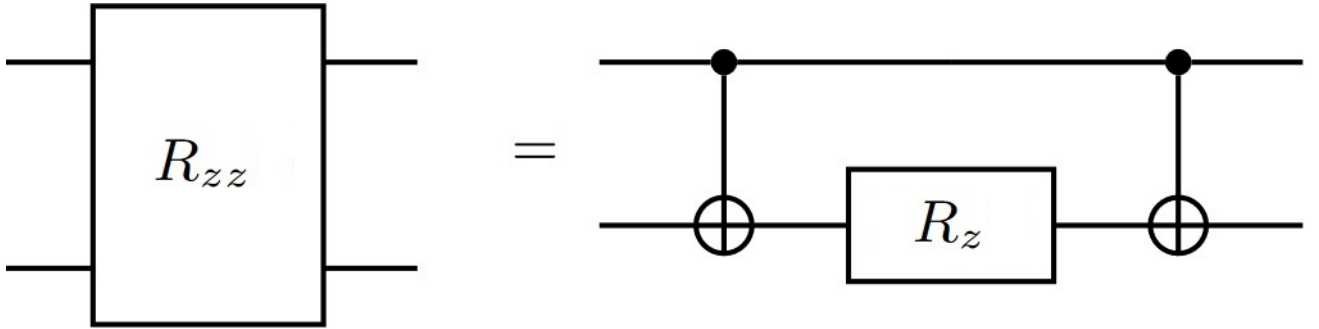


Figura 3.16: Símbolo da Porta Lógica R_{zz} . Fonte: Autor.

As portas lógicas R_{zz} são importantes pois permitem a implementação de interações específicas entre qubits que são cruciais para certos algoritmos quânticos, como a simulação de sistemas físicos e a execução de algoritmos de otimização. Elas facilitam a criação de estados emaranhados e a capacidade de controlar a interação entre qubits através de um parâmetro θ permite a realização de operações complexas e fundamentais à computação quântica.

3.2.3 Portas lógicas de 3 qubits

Aqui iremos nos limitar à porta Toffoli. A porta Toffoli, também conhecida como porta CCNOT (Controlled-Controlled-NOT), é uma porta lógica quântica de 3 qubits que realiza uma operação

NOT (ou inversão) no terceiro qubit somente se os dois primeiros qubits estiverem ambos no estado $|1\rangle$.

3.2.3.1 Porta Toffoli

Introduzida por Tommaso Toffoli, é uma porta CNOT com dois qubits de controle e um qubit de destino. A porta Toffoli é uma porta lógica reversível universal, o que significa que qualquer circuito reversível clássico pode ser construído a partir de portas Toffoli.

- **Representação Matricial**

Sua representação matricial é dada por:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

Formalmente, descrevemos a porta de Toffoli com a seguinte tabela verdade:

Entrada			Saída		
0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	1
0	1	0	0	1	0
0	1	1	0	1	1
1	0	0	1	0	0
1	0	1	1	0	1
1	1	0	1	1	1
1	1	1	1	1	0

Figura 3.17: Tabela Controle-Alvo. Fonte: Autor

- **Atuação na Base Computacional e Representação em Circuitos Quânticos**

Representação em circuitos quânticos é dada por:

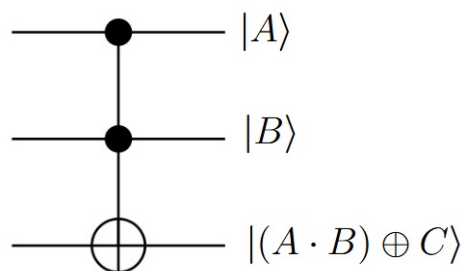


Figura 3.18: Tabela Controle-Alvo. Fonte: Autor

3.3 Conceitos sobre Circuitos Quânticos

Na teoria da informação quântica, que envolve uma série de outras subáreas, são descritos elementos denominados circuitos quânticos, são os modelos análogos dos circuitos clássicos, mas, em uma versão coerente com a computação quântica. Tratam-se os circuitos em computação em uma sequência de portas quânticas, medições, inicializações de qubits para valores conhecidos. O conjunto mínimo de ações que um circuito precisa ser capaz de realizar nos qubits para permitir a computação quântica é conhecido como critério de DiVincenzo, [126], que apresenta sete condições, serão descritas, muito embora, não serão detalhadas, pois vão além do escopo da presente dissertação.

Estes critérios, tratam-se de condições necessárias para a construção de um computador quântico, que foram introduzidas em 2000 pelo físico teórico David P. DiVincenzo, [126], como sendo necessárias para se construir um computador que fora idealizado inicialmente por pelo geometra-álgebra Yuri Manin, em 1980, [21], além do físico Richard Feynman, em 1982, [23] — como um meio de simular eficientemente sistemas quânticos, como por exemplo, na resolução do problema quântico de muitos corpos. A descrição dinâmica das partículas pode ser clássica (Newton/Einstein) ou quântica (Schrödinger/Dirac). De acordo com estes critérios, a construção de um computador quântico exigiria que a configuração experimental atendesse a sete condições, sendo as cinco primeiras necessárias à computação quântica, [126]:

- Um sistema físico escalável com qubit bem caracterizado;
- A capacidade de inicializar o estado dos qubits para um estado fiducial simples;
- Longos e relevantes tempos de decoerência;

- Um conjunto que pode-se denominar por falta de melhor expressão universal de portas quânticas;
- Capacidade de medição específica de um qubit;

Os dois restantes são necessários são relativos à comunicação quântica:

- A capacidade de interconverter qubits estacionários e voadores³, [127], [128];
- A capacidade de transmitir fielmente qubits voadores entre locais especificados.

3.4 Propriedades dos Circuitos Quânticos

Em suma, circuitos quânticos baseados em portas representam sequências de operações da mecânica quântica realizadas de forma controladas, que agem sobre informações armazenadas em um ou mais qubits, [77].

No que tange a implementação física do qubit depende fortemente da tecnologia subjacente, por exemplo, qubits são realizados com junções de Josephson⁴ em supercondutores quânticos ou ainda podem ser íons individuais, neste caso de uma máquina quântica de confinamento de íons, [77].

Abstraindo-se as diferenças, a máquina quântica dá permissividade para se utilizar as propriedades da mecânica quântica para realizar trabalhos úteis, que incluem superposição e emaranhamento. A superposição é uma consequência da natureza das máquinas quânticas e o emaranhamento dá permissividade para criarmos correlações quânticas entre dois ou mais qubits, [77].

Graças às duas propriedades supra citadas, é possível que um circuito quântico de n qubits operar em 2^n valores simultaneamente. Isto porque, relativamente à superposição, não está se operando em valores binários fixos mas, em distribuições de probabilidade, [77]. Como resultado cada valor está presente com uma probabilidade associada p . A capacidade de criar qubits co-dependentes por meio do emaranhamento, propriedade descrita em (2.3.2), é uma ferramenta poderosa, capaz de permitir, entre outras tarefas, criar tolerâncias às falhas nas implementações de portas quânticas, [77].

³Considerando-se a realização de operações quânticas em qubits enquanto estes são transferidos de forma coerente, resultando nos denominados *qubits voadores* e no controle do emaranhamento não local com as vantagens de escalabilidade em relação aos qubits estáticos. Já construída com base em sistemas fotônicos quânticos e eletrônicos, uma arquitetura de qubit voador serve como um link de comunicação entre computadores quânticos e transmissão segura de dados para a internet quântica

⁴consiste em duas camadas supercondutoras separadas por uma fina camada isolante, permite a passagem de corrente elétrica sem resistência, devido ao fenômeno quântico conhecido como efeito Josephson, que dá permissividade para que uma corrente contínua, flua através da junção mesmo sem tensão aplicada e que uma corrente alternada flua quando uma tensão em corrente contínua é aplicada.

Uma consequência de trabalhar com operações de mecânica quântica (ou portas) é que são unitárias. Assim, existe uma operação que desfaz o trabalho realizado por uma operação mecânica quântica realizada anteriormente, de forma mais específica, para uma determinada rede de portas, existe uma rede de portas que desfaz os resultados da computação. Naturalmente, isso significa que portas e circuitos quânticos são por natureza reversíveis. Como resultado, tem-se que:

- (i) as informações não são destruídas;
- (ii) o mapeamento entre entradas e saídas do circuito é um a um.

3.4.1 Medição em Mecânica Quântica

No que tange o designer do circuito quântico é concebido para trabalhar exclusivamente com portas reversíveis. Para determinar o resultado do cálculo, o conteúdo de um registro quântico precisa ser medido.

Como leciona [129], a medida também encontra uso quando o resultado do cálculo de um circuito quântico precisa ser fornecido como entrada para um circuito clássico. Para se ilustrar a medição, precisa-se de uma maneira de apresentar os estados quânticos. Isso pode ser realizado por intermédio da utilizando-se vetores e matrizes. Considerando-se um qubit, X , os seus observáveis são 0 e 1, que pode-se representar na forma vetorial como:

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.35)$$

Portanto, pode-se representar B quando em superposição da seguinte forma:

$$|B\rangle = \alpha \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \beta \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

A medida projetiva, a qual dar-se-á descrição, refere-se a um processo de medição determinístico em sistemas quânticos em que um conjunto de operadores ortogonais, conhecidos como projetores, serão utilizado para observar os resultados. Essas medições são repetíveis e o resultado observado é determinístico.

Quando V tem um produto interno e é completo, ou seja, quando V é um espaço de Hilbert, o conceito de ortogonalidade pode ser usado. Uma projeção $\mathbb{P}$ em um espaço de Hilbert V denomna-se projeção ortogonal se satisfaz $\langle \mathbb{P}\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbb{P}\mathbf{y} \rangle$ para todo $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$. Uma projeção em um espaço de Hilbert que não é ortogonal é denominada projeção oblíqua.

- **Postulado da Medição**

Postulado 3.4.1 (Medição). *Cada resultado de medição de um sistema será representada por um operador linear denotado por Q , satisfazendo $0 \leq Q \leq I$, em que está a identidade. A probabilidade de resultado no estado é, [130]*

$$\mathbb{P}(Q, \psi) = \langle \psi | Q | \psi \rangle \quad (3.37)$$

- **Completude:**

Uma medição completa representada pelos operadores correspondentes aos seus resultados, que são denotados por $Q_1, \dots, Q_n$, que devem satisfazer a condição de normalização, como segue, [130]:

$$\sum_{i=1}^n Q_i = I \quad (3.38)$$

Encontra-se em [131], a seguinte notação que é análoga a expressão (3.38):

$$\sum_n |a_n\rangle \langle a_n| = I \quad (3.39)$$

- **Medições Projetivas**

É conveniente iniciar com um preâmbulo, em que dar-se-á a definição do operador projetivo, que segue abaixo:

Definição 3.4.1. *Uma projeção em um espaço vetorial V sobre um corpo K é um operador linear $\mathbb{P}: V \rightarrow V$, tal que, [132], [133]*

$$\mathbb{P}^2 = \mathbb{P}. \quad (3.40)$$

A bem da tecnicidade, trata-se de uma síntese de todos os conceitos e formalizações anteriores, pertinentes a subsecção (3.4.1), cuja síntese segue na definição abaixo.

Definição 3.4.2 (Medições Projetivas). *levando-se já estabelecidos os projetores, pode-se definir uma medida projetiva, de uma maneira mais técnica e concisa. Trata-se de um conjunto de projetores $B = \{\Pi_i\}_{i=0}^m$ tal que $\sum_{i=0}^m \Pi_i = I$. A última condição denomina-se de relação de completude. Se cada Π_i é de posto um, ou seja, $\Pi_i = |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$, então diz-se que B modela uma medida na base $\{|\psi_i\rangle\}$. Frequentemente, medir-se-á a partir da base computacional, que é especificada por $B = \{|0\rangle \langle 0|, |1\rangle \langle 1|\}$ no caso de $\mathbb{C}^2$. A generalização da-se da forma que se segue, $B = \{|i\rangle \langle i|\}_{i=0}^{n-1}$ para $\mathbb{C}^n$, [134].*

Muito embora tenha-se tratado do Postulado da Medida e até mesmo da Medida Projetiva, deve-se notar que não são um tipo único de medição, entretanto, têm-se estruturas mais gerais de medida que se tratam de uma operação quântica, [135].

3.4.2 Conceito de Medição aplicado à Computação Quântica

A tarefa de medição quântica representa uma operação da mecânica quântica projetiva, podendo haver outras modalidades [77]. Uma vez dado o formalismo matemático, para descrever os estados quânticos como qubits, agora deve-se voltar a atenção à medição. Neste caso, um qubit em superposição deve ser definido como um de um conjunto de observáveis, que são também denominados de autoestados no fim do cálculo, [77, 136, 137].

- **Observáveis**

Sob a égide de noção de observável na mecânica quântica, pode-se compreender qualquer propriedade de um dado sistema em algum estado, cujo qual pode ser medido em algum experimento, *grosso modo*.

De um ponto de vista estritamente matemático, os observáveis são postulados como operadores hermitianos que mapeiam o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ sobre si mesmo e têm as seguintes propriedades:

Propriedade 1. Os autovalores dos observáveis pertencem ao corpo dos reais e são resultados possíveis de medições de um dado observável;

Propriedade 2. Os autovetores correspondentes abrangem o espaço de Hilbert, que significa que cada observável gera uma base ortonormal, cujos elementos constituirão o estado após a realização da medição.

- Medições Projetivas

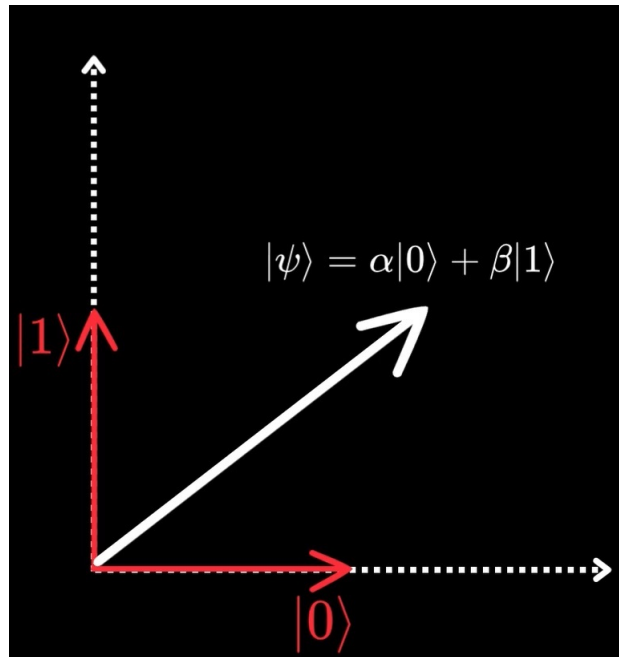


Figura 3.19: Conceito de Medição Projetiva. Fonte: Autor

- Projeção no Eixo Horizontal

No caso da figura (3.19), deve-se notar que $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, também que $M_0|0\rangle\langle 0|$, além de

$$P[\text{sair} = |0\rangle] = |\alpha|^2 \quad (3.41)$$

$$|\psi\rangle = \frac{M_0|\psi\rangle}{\sqrt{P[\text{sair} = |0\rangle]}} \quad (3.42)$$

Das equação (3.41) e (3.42), tem-se que

$$|\psi\rangle = \frac{\alpha|0\rangle}{|\alpha|}. \quad (3.43)$$

O que é descrito geometricamente pela figura abaixo:

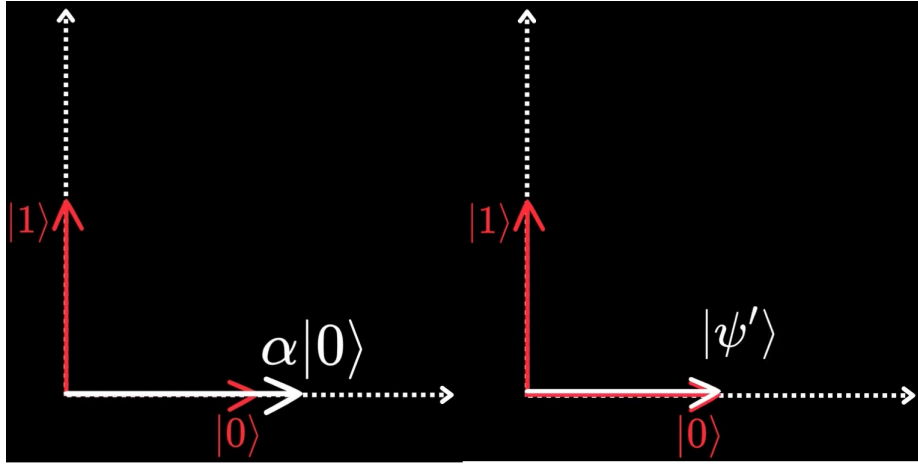


Figura 3.20: Conceito de Medição Projetiva: Projeção no eixo horizontal. Fonte: Autor

• Projeção no Eixo Vertical

Para este caso o processo é análogo, portanto, inicia-se observando-se a figura (3.19), deve-se notar que $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, também que $M_1|1\rangle\langle 1|$, além de

$$P[\text{sair} = |0\rangle] = |\beta|^2 \quad (3.44)$$

$$|\psi\rangle = \frac{M_0|\psi\rangle}{\sqrt{P[\text{sair} = |1\rangle]}} \quad (3.45)$$

Das equação (3.44) e (3.45), tem-se que

$$|\psi'\rangle = \frac{\beta|1\rangle}{|\beta|}. \quad (3.46)$$

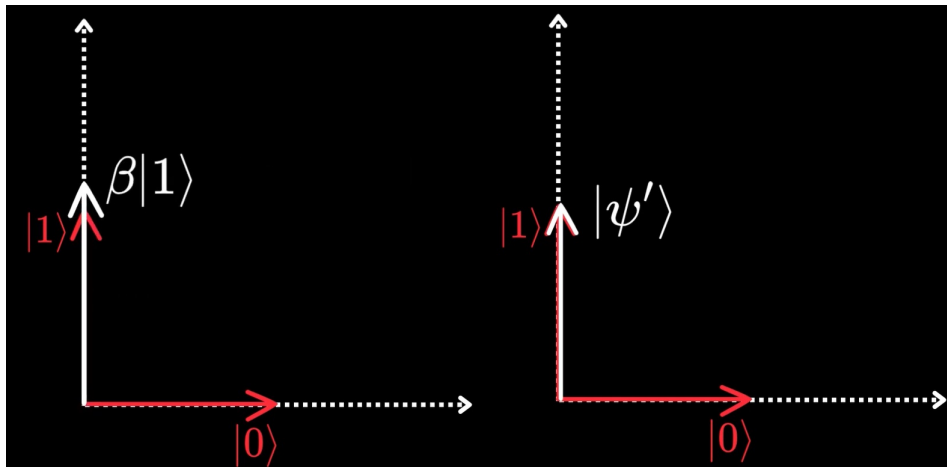


Figura 3.21: Conceito de Medição: Projeção no eixo vertical. Fonte: Autor

O símbolo $|\psi'\rangle$ descreve o estado pós-medição do sistema, em ambos os casos.

• Definição Formal de Computação Quântica

Trata-se uma computação quântica como sendo uma coleção dos três elementos:

1. Um registrador ou conjunto de registradores;
2. Uma matriz unitária U , que é adaptada para executar um dado algoritmo quântico;
3. Medidas para se extrair as informações necessárias.

Formalmente, define-se uma computação quântica a partir da definição que se segue, consoante a [135]:

Definição 3.4.3 (Computação Quântica). *Seja o conjunto $C_Q = \{\mathcal{H}, U, M_m\}$, em que o espaço de Hilbert é identificado com o espaço complexo de 2-dimensional, $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{2^n}$, que se trata do espaço de Hilbert de um registrador de n qubits, $U \in U(2^n)$, que representa um algoritmo quântico e $\{M_m\}$ é o conjunto de operadores de medida. O hardware (1), juntamente com o equipamento para controlar os qubits para executar (2) além de (3) denomina-se computador quântico.*

3.4.3 Representação em forma de Diagrama de Circuitos Quânticos

Os circuitos são escritos de tal forma que o eixo horizontal seja o tempo, começando no lado esquerdo e terminando no lado direito. Ao se considerar circuito quântico, deve-se notar que o tempo flui da esquerda para a direita.

Deve-se considerar os fios horizontais representando os qubits, as duplas representam bits clássicos e os itens conectados por essas linhas são operações realizadas nos qubits, como medições ou portas. Essas linhas definem a sequência de eventos e geralmente não são cabos físicos. Quanto às portas quânticas, sua ordenação dá-se em ordem cronológica, seguindo-se o seguinte critério, a porta mais à esquerda é a aplicada pela primeira vez aos qubits, [9, 138]. A representação gráfica dos elementos do circuito quântico é descrita usando uma variante da notação gráfica de Penrose, [139]. Feynman usou uma versão inicial da notação do circuito quântico em 1985, [124].

Um exemplo, seria a representação de uma Porta CNOT em um circuito quântico.

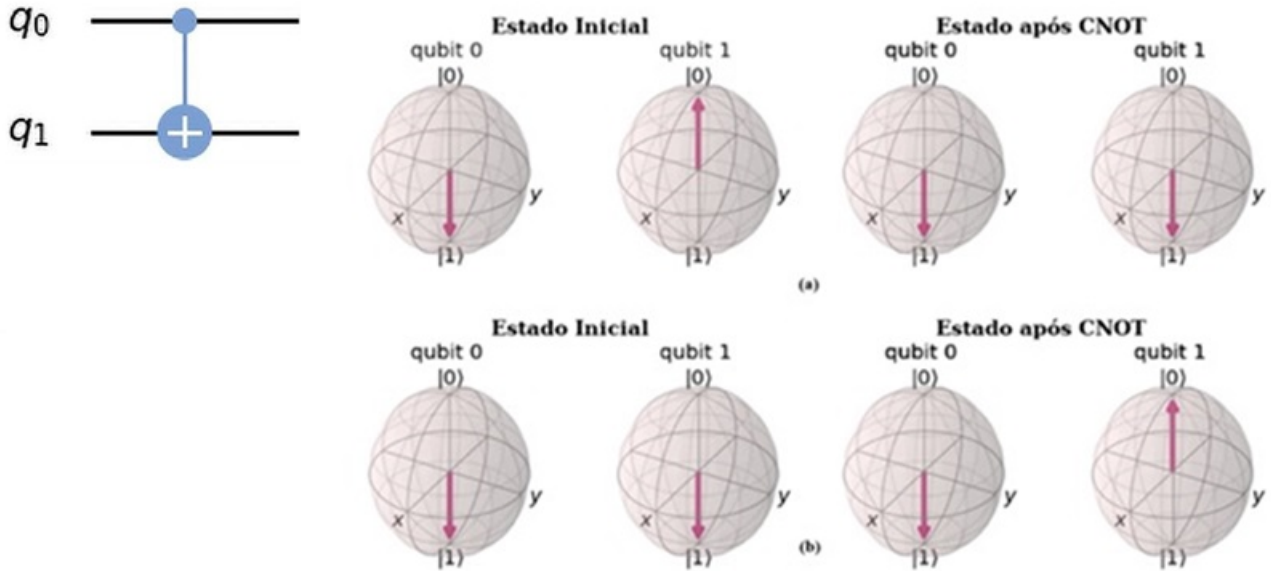


Figura 3.22: Representação na esfera de Bloch da atuação da porta CNOT sobre os estados das bases computacionais, $|10\rangle$, no caso, (a) e $|11\rangle$, no caso (b). Fonte: Autor

3.5 Conclusões e Síntese do Capítulo 3

No presente Capítulo discorremos sobre a natureza das portas lógicas quânticas, vimos sua representação matricial, como operam e como são organizadas em circuitos quânticos, que estão mergulhados *a priori* em um espaço de Hilbert $\mathbb{C}^2$, naturalmente, faz-se uma abstração para que as esferas de Bloch sejam visualizadas e para que se entenda o funcionamento de cada porta e suas características. É de fundamental importância as portas e os circuitos aqui descritos, assim, como também demos uma definição formal de computação quântica, que até então, figurava apenas como sendo um conceito sem uma definição adequada. Diante disto, temos agora condições de seguir com o trabalho introduzindo o formalismo QUBO, esses conceitos estão conectados pois ocorre que estes problemas podem ser mapeados em circuitos quânticos, especificamente usando recozimento quântico ⁵ ou algoritmos quânticos variacionais, para encontrar soluções ótimas.

⁵Trata-se de uma técnica de computação quântica objetivando-se resolver problemas de otimização, em que se busca encontrar o melhor estado de um sistema entre várias possibilidades. Baseia-se em um processo físico onde um sistema quântico é lentamente ajustado para atingir seu estado de menor energia, que corresponde à solução do problema.

Capítulo 4

QUBO: *Quadratic Unconstrained Binary Optimization*

Um conjunto de problemas de otimização combinatória, conhecido como *Quadratic Unconstrained Binary Optimization* (QUBO), possuindo aplicações em diversas áreas. Os problemas QUBO pertencem à classe NP-complexa, compreendendo muitos problemas clássicos da ciência da computação teórica, como por exemplo, o MaxCut e a coloração de grafos, [20, 140], podem ser reformulados e incorporados e modelados nesta classe. Estes problemas são de suma importância para a computação quântica adiabática, sendo resolvido por meio de um processo físico conhecido como recozimento quântico. [141].

4.1 Formulação do Problema QUBO versão Clássica

Inicialmente dar-se-á uma definição canônica dos problemas QUBO, utilizando formalismo matemático, dando-se assim um caráter de generalidade e elegância em sua formulação. [10].

- Formas Quadráticas

Definição 4.1.1 (Formas Quadráticas). *Seja uma forma quadrática $Q(x) = x^T A x$ e sua matriz simétrica A é definida positiva se $Q(x) > 0$ quando $x \neq 0$; semidefinida positiva se $Q(x) \geq 0$ quando $x \neq 0$; definida negativa se $Q(x) < 0$ quando $x \neq 0$; indefinida se $Q(x)$ assume valores positivos e negativos, [142].*

• **Formalismo QUBO Definição**

Definição 4.1.2 (Formalismo QUBO). *Seja o conjunto de vetores binários de comprimento fixo $n > 0$, denotado por $\mathbb{B}^n$, onde $\mathbb{B} = \{0, 1\}$ representa o conjunto de valores binários, podendo ser considerado sinônimo de bit. Considere uma matriz consoante à Definição (4.1.1), [143], $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, [144], cujas entradas Q_{ij} definem um peso para cada par de índices $i, j \in \{1, \dots, n\}$ no vetor binário. Define-se uma função $f_Q : \mathbb{B}^n \rightarrow \mathbb{R}$ que atribui um valor a cada vetor binário da seguinte forma, [10, 30, 145–147]¹:*

$$f_Q(x) = x^\top Q x = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i}^n Q_{ij} x_i x_j. \quad (4.1)$$

De forma intuitiva, o peso Q_{ij} é adicionado se x_i e x_j tiverem valor 1. Quando $i = j$, os valores Q_{ii} são adicionados se $x_i = 1$, sendo $x_i x_i = x_i$ para $\forall x_i \in \mathbb{B}$. Em suma, consiste o problema QUBO em encontrar um vetor binário x^* que seja mínimo em relação a f_Q , a saber $\forall x \in \mathbb{B}^n : f_Q(x^*) \leq f_Q(x)$. Em geral, x^* não apresenta unicidade, portanto, pode haver um conjunto de vetores minimizantes com valor igual em relação a f_Q . A complexidade do problema QUBO surge do número de vetores binários candidatos a serem avaliados, dado que $|\mathbb{B}^n| = 2^n$, o qual cresce exponencialmente.

Observação 4.1.1. *Observe-se que uma representação equivalente do problema QUBO que comumente figura na literatura de otimização e física é obtida quando o conjunto binário viável do problema é definido utilizando-se os valores -1 e 1 , ao invés de 0 e 1 , esse é o conjunto viável do problema e é dado por $x \in \{-1, 1\}^n$, a equivalência ocorre após a aplicação da transformação afim, (via isomorfismo), $x \mapsto 2x - 1$, que mapeia, $\{0, 1\}^n$ em $\{-1, 1\}^n$, neste caso, a Definição (4.1.2), refere-se ao formalismo de Ising², [54, 148–150].*

Teorema 4.1.1. *Formas quadráticas associadas a qualquer matriz A , são iguais à forma quadrática associada à sua parte simétrica, sendo assim, esta condição garante que a matriz em questão seja*

¹**Formulação Combinatória**, (faz uso do grupo de permutações): Seja um conjunto, C , denotado da forma seguinte, $C = \{c_1, \dots, c_n\}$, de n cidades c_i (ou nós) e uma matriz de distâncias denotada por (ρ_{ij}) , em que $\rho_{ij} = \rho(c_i, c_j)$, $(i, j \in \{1, \dots, n\}, \rho_{ij} = \rho_{ji}, \rho_{ii} = 0)$, sendo que a tarefa passa por encontrar a permutação $\pi \in S_n = \{s : \{1, \dots, n\} \rightarrow \{1, \dots, n\}\}$, faça com que a função perda $f : S_n \rightarrow \mathbb{R}$, seja descrita como $f(\pi) = \sum_{i=1}^{n-1} \rho\pi(i), \pi(i+1) + \rho\pi(n), \pi(1)$, atinja o mínimo, desta forma, o tamanho do espaço de procura aumenta exponencialmente pois, depende de n , o número de cidades (ou nós), uma vez que existem $(n-1)!/2 \approx \frac{1}{2} \sqrt{2\pi(n-1)} \left(\frac{n-1}{e}\right)^{n-1}$ circuitos possíveis

²Também é usual denominá-lo Formalismo de Lenz-Ising, uma vez que quem primeiro trouxe a lume a publicação foi Lenz, no ano de 1920.

uma matriz triangular superior.

Prova. Provar-se-a, que é a condição para que uma matriz seja triangular superior. Considere primeiro que qualquer matriz pode ser escrita como sendo a soma de matrizes simétricas e anti-simétricas da seguinte forma:

$$M = \frac{1}{2}(M + M^T) + \frac{1}{2}(M - M^T) = (M_S + M_A) \quad (4.2)$$

Note-se que

$$Q = x^T M_A^T x = x^T (-M_A) x = -x^T M_A x = -Q \text{ com } Q \rightarrow 0. \quad (4.3)$$

Finalmente

$$x^T M x = x^T (M_S + M_A) x = x^T M_S x + x^T M_A x = x^T M_S x + 0 = x^T M_S x. \quad (4.4)$$

□

O resultado final da equação (4.4), uma matriz simétrica.

4.1.1 Algumas Propriedades do Problema QUBO

O problema QUBO apresenta invariância por escala para fatores positivos $\alpha > 0$, que deixam o vetor ideal x^* inalterado:

$$f_{\alpha Q}(x) = \sum_{i \leq j} (\alpha Q_{ij}) x_i x_j = \alpha \sum_{i \leq j} Q_{ij} x_i x_j = \alpha f_Q(x) \quad (4.5)$$

O problema QUBO é da classe NP-complexo, não podendo ser resolvido eficientemente por nenhum algoritmo de tempo polinomial, [151]. No entanto, há exceções, em que Q possui certas propriedades, eis alguns exemplos, [152]:

- Sendo todos os coeficientes forem positivos, o ótimo é trivial $x^* = (0, \dots, 0)$, analogamente, no caso recíproco o ótimo é $x^* = (1, \dots, 1)$.
- Se Q for diagonal, os bits podem ser otimizados independentemente, e o problema pode ser resolvido em $\mathcal{O}(n)$.
- As atribuições de variáveis ideais são simplesmente $x_i^* = 1$ se $Q_{ii} < 0$, e $x_i^* = 0$, caso contrário.

- Se todos os elementos fora da diagonal de Q forem não positivos, o problema QUBO correspondente pode ser resolvido em tempo polinomial.

4.2 Conclusões e Síntese do Capítulo 4

Neste Capítulo discorreremos sobre problemas de otimização discreta complexos que surgem naturalmente em áreas diversas e que podem ser mapeados para problemas QUBO ou equivalentemente para hamiltonianos de Ising. Um modelo QUBO trata-se de um programa quadrático inteiro misto (cujo acróstico em inglês é MIQP) em que as variáveis de decisão são restritas a assumir valores binários e não há restrições explícitas. Expressar um problema de otimização no formalismo QUBO pode apresentar desvantagens significativas, por exemplo, as restrições precisam ser modeladas usando variáveis de penalidade, o que pode expandir significativamente o espaço de soluções e aumentar significativamente a dificuldade do problema.

O potencial de aplicação deste formalismo é vasto, devido às possibilidades de reformulação oferecidas pelo uso de penalidades de inviabilidade quadráticas como alternativa à imposição de restrições de maneira explícita, que nesta conotação, trata-se de uma vantagem, diferentemente do descrito no parágrafo anterior. Qualquer problema discreto linear ou quadrático (determinístico) com restrições lineares em variáveis inteiras limitadas pode, em princípio, ser reformulado neste formalismo por meio do uso de tais penalidades. Como será demonstrado, esse resultado tem mais do que significado teórico.

Uma ampla gama de problemas em otimização combinatória pode não apenas ser reexpressa como QUBO, mas também pode ser resolvida de maneira altamente eficaz quando expressa com este formalismo. O processo de reformulação de um determinado problema combinatório em uma instância do QUBO é de fácil implementação.

A estrutura de modelagem comum resultante, juntamente com os avanços relatados recentemente em métodos de solução para QUBO, servem para tornar o formalismo uma alternativa viável aos modelos de otimização combinatória mais tradicionais. Na dissertação, pretende-se utilizar do formalismo QUBO para tratar um problema que envolve otimização combinatória e teoria dos grafos, que é o Problema do Caixeiro Viajante, um problema que pode ser resolvido, utilizando esse formalismo, juntamente com a computação quântica. No próximo Capítulo, alguns algoritmos serão apresentados para que se tenha uma perspectiva histórica de tentativas de resolução do PCV.

Capítulo 5

O Problema do Caixeiro Viajante

5.1 Histórico

As origens do Problema do Caixeiro Viajante são obscuras, sem registros claros sobre seu surgimento. Contudo, há menções ao problema em um manual para caixeiros viajantes de 1832, que inclui exemplos empíricos de rotas pela Alemanha e Suíça, embora sem qualquer formalismo matemático [1]. A formulação matemática do problema ocorreu no século XIX, com contribuições do matemático irlandês William Rowan Hamilton e do britânico Thomas Kirkman [2]. Hamilton, por exemplo, criou o jogo icosiano, um quebra-cabeça recreativo que explorava o que hoje é conhecido como ciclo Hamiltoniano (ou circuito Hamiltoniano, são sinônimos).

Em muitos sentidos, os aspectos práticos deste problema lembram as sete pontes de Königsberg, um problema matemático que foi a base para a invenção de Euler do ramo denominado teoria dos grafos. [153].

Uma abordagem mais sistemática ao PCV surgiu na década de 1930, quando matemáticos em Viena e Harvard começaram a estudá-lo formalmente. Karl Menger identificou o problema, sugeriu a abordagem por força bruta como solução óbvia e apontou limitações em heurísticas como o método do vizinho mais próximo. Por sua vez, Merrill M. Flood, na mesma época, aplicou o formalismo ao problema prático de roteamento de ônibus escolares.

Nos anos 1940, Hassler Whitney, da Universidade de Princeton, estudou o problema sob o nome de “Problema dos 48 Estados” [154, 155]. A primeira referência ao termo “Problema do Caixeiro Viajante” aparece no relatório da RAND Corporation de 1949, de autoria de Julia Robinson [18]. Durante as décadas de 1950 e 1960, a RAND Corporation promoveu a popularização do problema ao oferecer prêmios por soluções parciais, incentivando contribuições significativas de

George Dantzig, Delbert Ray Fulkerson e Selmer M. Johnson. Esses pesquisadores formularam o problema usando programação linear inteira e desenvolveram o método dos planos de corte, resolvendo instâncias com até 49 cidades [19]. Eles também exploraram métodos como o branch-and-bound, utilizado para refinar soluções quase ótimas.

O trabalho continuou a evoluir nas décadas seguintes. Em 1959, Jillian Beardwood, J.H. Halton e John Hammersley introduziram o teorema de Beardwood-Halton-Hammersley, que fornece estimativas práticas para o comprimento de caminhos em problemas de grande escala [156]. Na década de 1960, surgiu uma abordagem alternativa focada em soluções aproximadas com limites inferiores comprovados, permitindo o uso mais eficiente de métodos como branch-and-bound.

Nas décadas de 1970 e 1980, avanços notáveis vieram com Grötschel, Padberg, Rinaldi e outros, que resolveram instâncias com até 2.392 cidades, [157] usando técnicas avançadas de planos de corte. Em 1972, Richard M. Karp provou que o ciclo Hamiltoniano era NP-completo, consolidando a classificação do PCV como um problema de alta complexidade computacional. Ainda na década de 1970, Christofides e Serdiukov introduziram de forma independente o algoritmo de aproximação que leva seus nomes, garantindo soluções com um comprimento no máximo 1,5 vezes maior que o valor ótimo [158].

A partir dos anos 1990, o programa Concorde, desenvolvido por Applegate, Bixby, Chvátal e Cook, tornou-se uma referência na solução de instâncias grandes do PCV. Em 1991, Gerhard Reinelt publicou o PCVLIB, um repositório de exemplos utilizados para testar e comparar algoritmos [159]. Em 2006, Cook e colaboradores resolveram um problema envolvendo 85.900 cidades, marcando o maior progresso na época, naturalmente demandando um altíssimo custo computacional [160].

Mais recentemente, em 2011, melhorias foram feitas no algoritmo de Christofides-Serdiukov para grafos específicos, e em 2020, essas melhorias foram estendidas ao PCV métrico completo, ampliando as aplicações práticas do problema [161]. Hoje, o PCV continua sendo uma área de intensa pesquisa, com aplicações em logística, biologia computacional e fabricação de microchips, entre outras áreas.

5.2 Descrição do Problema

O Problema do Caixeiro Viajante é um dos desafios mais conhecidos em otimização combinatória, com ampla relevância em ciência da computação teórica e pesquisa operacional [18, 156]. Ele busca determinar a rota mais curta que permita visitar um conjunto de cidades exatamente

uma vez e retornar ao ponto de origem. A versão de decisão do PCV, que consiste em verificar se existe um ciclo Hamiltoniano com comprimento menor ou igual a um valor dado L , pertence à classe NP-completa [162].

Embora originalmente concebido como um problema logístico, suas aplicações são vastas, abrangendo áreas como fabricação de microchips, sequenciamento de DNA e astronomia [156,159]. Nessas aplicações, os conceitos de *idades* e *distâncias* podem ser reinterpretados, como fragmentos de DNA e similaridades entre eles, ou alvos celestes e tempos de movimentação do telescópio.

Como já enfatizamos, o PCV pode ser representado como um grafo ponderado, onde os vértices correspondem às cidades e as arestas representam os caminhos entre elas, com pesos associados às distâncias ou custos [157]. A versão simétrica do problema considera as distâncias iguais em ambas as direções, enquanto a versão assimétrica permite variações, tornando-se mais representativa de aplicações práticas.

Apesar de sua complexidade, heurísticas e algoritmos exatos têm possibilitado a resolução de instâncias com milhares de vértices ou aproximações de alta qualidade para milhões de cidades [160]. A seguir, formalizaremos matematicamente esse problema, destacando suas principais propriedades e restrições.

5.3 Formulação Matemática

O Problema do Caixeiro Viajante pode ser formalmente definido no contexto de grafos ponderados. Seja um grafo completo não direcionado $G = (V, E)$, onde V é o conjunto de vértices representando as cidades, e E é o conjunto de arestas que conectam essas cidades, com um peso associado $w : E \rightarrow \mathbb{R}^+$ indicando a distância ou custo entre cada par de vértices [163]. O objetivo do problema é encontrar um ciclo Hamiltoniano de custo mínimo, ou seja, uma sequência que:

- Visite todos os vértices exatamente uma vez;
- Retorne ao vértice de origem;
- Minimize o custo total associado à soma dos pesos das arestas percorridas.

Matematicamente, o problema pode ser formulado como um problema de programação inteira, utilizando variáveis binárias x_{ij} , que indicam se a aresta (i, j) pertence ao ciclo ($x_{ij} = 1$) ou não

($x_{ij} = 0$). A formulação é dada por:

$$\min \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} x_{ij},$$

sujeito às seguintes restrições:

1. Cada vértice deve ser visitado exatamente uma vez:

$$\sum_j x_{ij} = \sum_i x_{ij} = 1, \quad \forall i, j \in V,$$

2. Deve formar-se um único ciclo conectando todos os vértices:

$$\sum_{i,j \in S} x_{ij} \leq |S| - 1, \quad \forall S \subset V, S \neq \emptyset.$$

A última restrição, conhecida como restrição de eliminação de subciclos, garante que não se formem ciclos menores dentro da solução. No contexto do Problema do Caixeiro Viajante, a solução ideal deve ser um único ciclo Hamiltoniano que conecta todos os vértices, e não múltiplos ciclos menores que visitam subconjuntos dos vértices. Como já dissemos, a variável x_{ij} é binária e indica se a aresta (i, j) está incluída na solução. A soma de x_{ij} sobre um subconjunto S de vértices, $\sum_{i,j \in S} x_{ij}$, representa o número de arestas conectando os vértices dentro desse subconjunto S . Dessa maneira, a restrição acima garante que qualquer subconjunto de vértices S não forme um ciclo completo separado. Ou seja, o número de arestas dentro de S deve ser inferior ao número de vértices de S , evitando que S se feche como um ciclo independente do resto do grafo. De fato, se um subconjunto S forma um ciclo completo, o número de arestas conectando os vértices de S será exatamente $|S|$. Desta maneira, ao impormos que $\sum_{i,j \in S} x_{ij} \leq |S| - 1$, nós garantimos que pelo menos uma conexão está faltando dentro de S , forçando os vértices de S a se conectarem ao restante do grafo para formar um único ciclo que inclua todos os vértices.

Essa formulação é válida tanto para a versão simétrica do problema, onde $w(v_i, v_j) = w(v_j, v_i)$, quanto para a versão assimétrica, na qual $w(v_i, v_j) \neq w(v_j, v_i)$ em geral. No caso assimétrico, o grafo é direcionado, e as arestas possuem orientações específicas.

Apesar de sua simplicidade na definição, o PCV é um problema NP-complexo, o que significa que não se conhece, até o momento, um algoritmo eficiente para encontrar a solução ótima em tempo polinomial. Isso o torna um dos problemas mais desafiadores e amplamente estudados em

otimização combinatória. Na próximas subseção iremos apresentar diversas abordagens utilizadas na resolução do PCV. Na Seção (5.4.6), abordaremos em detalhes o algoritmo de Bellman-Held-Karp. Esse algoritmo, baseado em programação dinâmica, explora a estrutura do problema para reduzir o espaço de busca, alcançando uma complexidade de $O(n^2 2^n)$. Embora não seja prático para instâncias muito grandes, o Bellman-Held-Karp representa um marco na história dos métodos exatos para o PCV e serve como base para o desenvolvimento de novas técnicas na área. De qualquer forma, os avanços nas técnicas de programação linear, heurísticas e algoritmos quânticos abriram caminhos para resolver o PCV com maior eficiência, dependendo do contexto e dos requisitos de precisão.

5.4 Soluções do PCV por Algoritmos

O Problema do Caixeiro Viajante é um dos problemas mais estudados em otimização combinatória devido à sua complexidade e ampla aplicabilidade. Nesta seção, apresentamos as principais abordagens para resolvê-lo, classificadas em métodos exatos, heurísticas e algoritmos de aproximação. Além disso, discutimos casos especiais do problema e sua complexidade computacional, destacando avanços recentes e as limitações de cada estratégia.

5.4.1 Métodos Exatos

Os métodos exatos garantem a obtenção de soluções ótimas para o PCV, porém são viáveis apenas para instâncias com um número limitado de cidades devido ao aumento exponencial do tempo de execução. Entre os métodos mais conhecidos, destacam-se:

- **Força Bruta:** Consiste em avaliar todas as permutações possíveis para encontrar o ciclo de menor custo. Esse método possui complexidade computacional $O(n!)$, o que o torna impraticável para $n > 20$ [11].
- **Branch-and-Bound:** Baseado em uma enumeração implícita em árvore, este método utiliza limites inferiores para podar subárvores que não podem conter a solução ótima. Embora eficiente para problemas pequenos, sofre com o crescimento exponencial do espaço de busca [12].
- **Held-Karp:** Um algoritmo de programação dinâmica que resolve o problema em tempo $O(n^2 2^n)$, representando uma melhoria significativa em relação à força bruta [13].

5.4.2 Métodos Heurísticos

As heurísticas¹ oferecem soluções aproximadas em tempo polinomial, sendo amplamente utilizadas em aplicações práticas. Apesar de não garantirem a solução ótima, elas produzem resultados aceitáveis em um prazo razoável. Entre as principais abordagens estão:

- **Heurísticas Construtivas:** Métodos como o *Algoritmo do Vizinho Mais Próximo*, que seleciona iterativamente a cidade mais próxima, fornecem soluções rápidas, mas podem apresentar até 25% de erro em relação ao caminho ideal [14].
- **Heurísticas de Melhoria:** Métodos como *2-opt* e *3-opt*, que iterativamente removem e substituem arestas para reduzir o custo total do caminho, são amplamente aplicados devido à sua simplicidade e eficiência [15].
- **Colônia de Formigas:** Inspirada no comportamento de formigas, esta técnica utiliza trilhas de feromônio para guiar a construção de soluções e é especialmente eficaz para problemas de grande escala [16].

5.4.3 Algoritmos de Aproximação

Os algoritmos de aproximação fornecem garantias de desempenho, sendo úteis para problemas em que uma solução ótima é inviável. Um dos mais notáveis é o **Algoritmo de Christofides-Serdyukov**, que fornece uma solução com custo no máximo 1,5 vezes o valor ótimo em instâncias métricas [17].

5.4.4 Casos Especiais

Certas variações do PCV possuem características que permitem a aplicação de técnicas específicas:

- **PCV Métrico:** As distâncias entre as cidades satisfazem a desigualdade triangular, permitindo a utilização de algoritmos mais eficientes [164].
- **PCV Euclidiano:** Com distâncias baseadas na métrica euclidiana, soluções aproximadas podem ser obtidas em tempo polinomial [165].

¹Diversas abordagens de otimização metaheurística foram criadas e aplicadas recentemente em diferentes áreas, dentre estas, muitas abordagens são inspiradas em comportamentos de enxames na natureza, mas, há uma que estuda a resolução de problemas de otimização utilizando o Algoritmo do Buraco Negro (BHA), um algoritmo baseado em população.

5.4.5 Complexidade Computacional

O PCV é um problema NP-completo e, na sua versão de decisão, pertence à classe NP-completa [162]. Avanços recentes incluem algoritmos de aproximação para o PCV assimétrico com desigualdade triangular, que alcançam fatores de aproximação constantes [166]. No entanto, para instâncias gerais, limitações como a taxa de inaproximabilidade $\frac{75}{74}$ permanecem [167].

5.4.6 Algoritmo de Bellman–Held–Karp

O algoritmo de Bellman–Held–Karp, introduzido independentemente por Bellman (1962) e Held e Karp (1962) [168, 169], é uma solução exata baseada em programação dinâmica para o Problema do Caixeiro Viajante (PCV). O algoritmo resolve o PCV ao minimizar o custo de um ciclo Hamiltoniano, visitando todas as cidades exatamente uma vez e retornando à origem. Apesar de sua complexidade exponencial, $O(n^2 \cdot 2^n)$, ele é notavelmente mais eficiente do que a força bruta $O(n!)$ e serve como uma abordagem teórica essencial em otimização combinatória.

Sua formulação matemática é a seguinte: seja um grafo completo ponderado $G = (V, E)$, onde V é o conjunto de vértices (representando as cidades) e E o conjunto de arestas com pesos (representando as distâncias entre as cidades). O objetivo é encontrar um ciclo Hamiltoniano de menor custo. O algoritmo utiliza a seguinte definição recursiva para o custo $C(x_i, S)$ do caminho mais curto que começa no vértice inicial x_1 , visita todos os vértices de um subconjunto $S \subseteq V$, e termina no vértice $x_i \in S$, [170]:

$$C(x_i, S) = \min_{x_j \in S \setminus \{x_i\}} \left(C(x_j, S \setminus \{x_i\}) + d_{ji} \right),$$

com a condição inicial para subconjuntos unitários, [170]:

$$C(x_i, \{x_i\}) = d_{1i},$$

onde d_{ij} é a distância entre os vértices x_i e x_j . Ao final, o menor ciclo Hamiltoniano é obtido como, [170]:

$$\text{Ciclo mínimo} = \min_{x_i \in V \setminus \{x_1\}} \left(C(x_i, V \setminus \{x_1\}) + d_{i1} \right). \quad (5.1)$$

Elucidando o método, $S \setminus x_i$ representa o subconjunto de S sem o vértice x_i , $C(x_j, S \setminus x_i)$ é o custo mínimo de um caminho que começa no vértice inicial x_1 , visita todos os vértices de $S \setminus x_i$ e termina em x_j e d_{ji} é o custo da aresta que conecta o vértice x_j ao vértice x_i . Neste sentido, a

fórmula minimiza o custo do caminho ao considerar todos os possíveis vértices x_j de onde se pode chegar a x_i . Como condição inicial, para iniciar o cálculo, o custo de percorrer um único vértice é definido como $C(x_i, \{x_i\}) = d_{1i}$ onde d_{1i} é o custo para ir diretamente do vértice inicial x_1 ao vértice x_i , [170].

Após calcular os custos para todos os subconjuntos possíveis e todas as combinações de vértices, o menor ciclo Hamiltoniano é dado pela Eq. (5.1). No caso, $V \setminus x_1$ é o conjunto de todos os vértices exceto o vértice inicial x_1 , $\text{cost}(x_i, V \setminus x_1)$ é o custo mínimo de um caminho que começa no vértice inicial x_1 , passa por todos os outros vértices exatamente uma vez, e termina em x_i e d_{i1} é o custo para retornar ao vértice inicial x_1 a partir do último vértice x_i . Neste sentido, a fórmula encontra o ciclo completo de menor custo, considerando todos os caminhos possíveis que terminam em diferentes vértices, [170].

Vale enfatizar que, apesar de exato, o método é ainda custoso computacionalmente. De fato, existem 2^n subconjuntos S do conjunto de vértices e, para cada subconjunto S , avaliamos n vértices x_i e até $n - 1$ vértices x_j . Isso nos dá uma complexidade computacional $O(n^2 \cdot 2^n)$ visto que o algoritmo armazena os custos intermediários em uma tabela de tamanho $O(n \cdot 2^n)$ (n vértices e 2^n subconjuntos de V) e para cada entrada da tabela, é necessário calcular o mínimo sobre até n valores.

Embora impraticável para grafos com grande número de nós (ou cidades), esta abordagem é eficiente para instâncias menores ou para análise teórica. Além disso, o algoritmo Bellman–Held–Karp é uma solução exata para o PCV, oferecendo uma alternativa eficiente à força bruta em termos de complexidade, sendo importante no estudo de programação dinâmica e otimização combinatória. Apesar de suas limitações práticas para instâncias grandes, ele é frequentemente usado como *benchmark* para validar heurísticas e algoritmos aproximados, sendo esse o intuito em nosso trabalho.

Algoritmo Bellman-Held-Karp

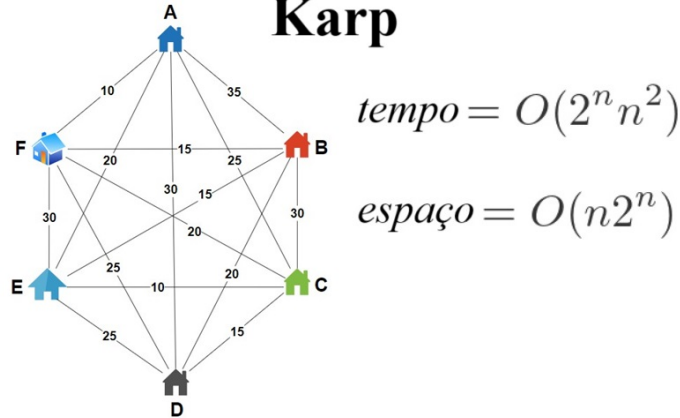


Figura 5.1: Exemplo de um diagrama de um circuito quântico. Fonte: Autor.

5.5 Isomorfismo de Grafos

Um isomorfismo dos grafos G e H , trata-se de uma bijeção entre os conjuntos de vértices de G e H .

$$f: V(G) \rightarrow V(H) \quad (5.2)$$

Tal que quaisquer dois vértices u e v de G são adjacentes em G se e somente se $f(u)$ e $f(v)$ são adjacentes em H . Denota-se esta bijeção como *bijeção com preservação de arestas*, de acordo com a noção geral de isomorfismo como uma bijeção com preservação de estrutura, [20].

Se existe um isomorfismo entre dois grafos, então são denominados isomorfos denotados por $G \simeq H$. No caso em que o isomorfismo é um mapeamento de um grafo sobre si mesmo, no caso em que G e H são um único e mesmo grafo, o isomorfismo denomina-se de automorfismo de G .

O isomorfismo de grafos é uma relação de equivalência em grafos e, como tal, particiona a classe de todos os grafos em classes de equivalência.

Um conjunto de grafos isomorfos entre si denomina-se de classe de isomorfismo de grafos. A questão de saber se o isomorfismo de grafos pode ser determinado em tempo polinomial é um grande problema não resolvido na ciência da computação, conhecido como o problema do isomorfismo de grafos, [171].

Os dois grafos mostrados abaixo são isomórficos, apesar de seus desenhos com aparência diferente.

ISOMORFISMOS DE GRAFOS

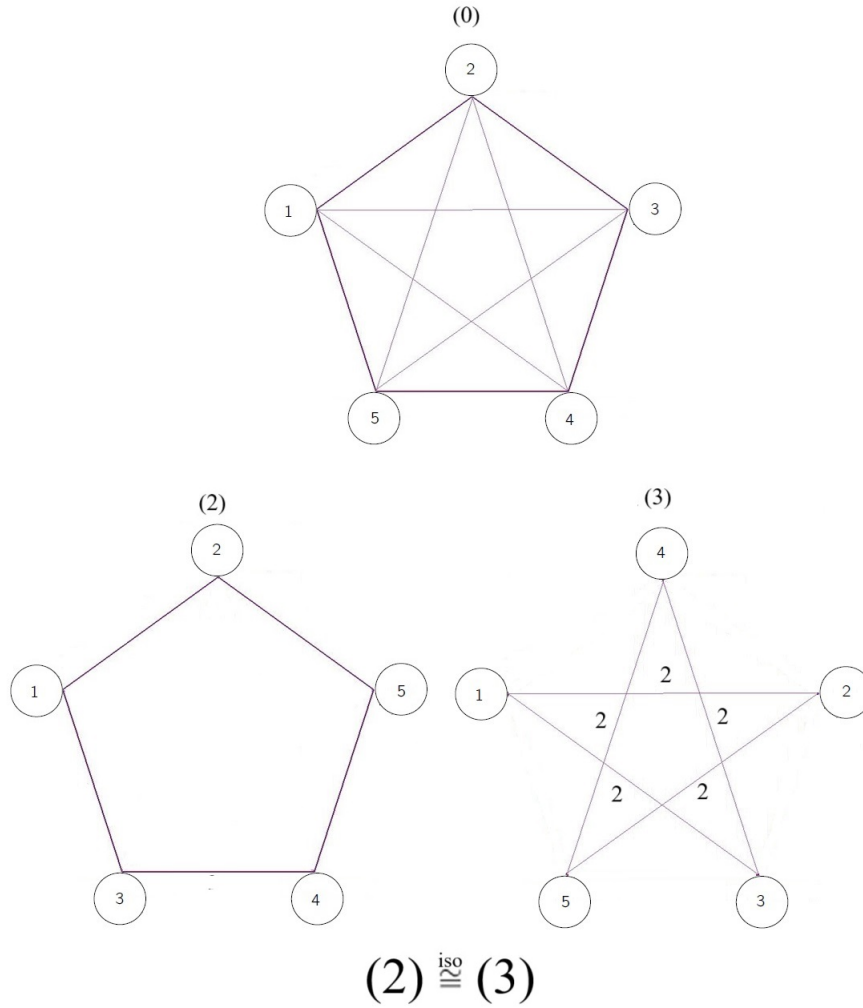


Figura 5.2: Isomorfismos de grafos. Fonte: Autor.

5.6 Conclusões e Síntese Capítulo 5

No presente Capítulo, perquirimos sobre o PCV e suas peculiaridades, que confere a este problema um grau de dificuldade surpreendente. A descrição mais sucinta deste problema pode assim ser enunciada, supor que que em um dado momento, devemos realizar uma entrega a n clientes, podemos usar apenas um único veículo o que não constitui um problema.

Nesse caso, iremos despachar um único veículo do depósito para n clientes, com o veículo retornando ao depósito após a entrega final.

Portanto, o PCV pode ser assim formulado: existem n nós e caminhos entre todos com comprimentos conhecidos. O objetivo é encontrar o caminho mais curto, que passe por todos os pontos uma única vez, começando e terminando no mesmo nó. Isso significa que o objetivo é encontrar o

trajeto de ida e volta mais curto possível. Dado, portanto, um conjunto de cidades e uma matriz de distâncias entre elas, o PCV consiste, então, em encontrar uma rota que:

- parta da cidade origem;
- passe por todas as demais cidades uma única vez;
- retorne à cidade origem ao final do percurso;
- percorra uma rota que dá a menor distância possível.

Denomina-se esta rota como ciclo fechado Hamiltoniano ². Não parece ser tão óbvio, mas o problema do PCV é um problema de otimização difícil. Trata-se de uma generalização do problema de encontrar o caminho mais curto entre todos os pontos em um conjunto de nós. No presente capítulo apresentamos vários algoritmos, alguns utilizando métodos exatos e heurísticas que resolvem o PCV, entretanto, não fazem uso dos ferramentais da computação quântica. A partir do formalismo QUBO e suas interconexões com outros algoritmos, se dará permissividade para a resolução do PCV utilizando-se da computação quântica, em suma isso quer dizer que já no próximo capítulo nos utilizaremos de conceitos como hamiltoniano, função de custo, entre outros que estão relacionados á esta modalidade de computação, incluindo a descrição do PCV a partir do formalismo QUBO, também irão figurar as penalidades já descritas de maneira sucinta.

²Problemas desta classe requerem que cada nó seja visitado uma única vez, já do tipo euleriano requerem que cada aresta seja percorrida uma única vez. Um grafo euleriano é um grafo conexo onde cada nó tem um grau par.

Capítulo 6

Mapeamento do Problema do Caixeiro Viajante em Hamiltonianos

Neste capítulo, exploramos a abordagem de traduzir problemas de otimização combinatória, descritos no formalismo QUBO, para o contexto de Hamiltonianos quânticos. A relevância dessa tradução está na possibilidade de resolver esses problemas em computadores quânticos por meio da determinação do estado fundamental de um Hamiltoniano. A seguir, apresentamos detalhadamente como a função custo do QUBO é mapeada em um Hamiltoniano.

6.1 Transcrição de um QUBO em um Hamiltoniano Quântico

O objetivo inicial é encontrar um Hamiltoniano H_c que codifique a função custo $C(\mathbf{x})$ de um problema QUBO, tal que:

$$\langle \mathbf{x} | H_c | \mathbf{x} \rangle = C(\mathbf{x}),$$

onde cada bit-string $\mathbf{x}$ é identificado como uma base computacional de um estado quântico. Como já vimos, a função custo de um problema QUBO é dada por:

$$C(\mathbf{x}) = \sum_{i,j} Q_{ij} x_i x_j + \sum_i c_i x_i,$$

onde Q_{ij} são os coeficientes de interação entre as variáveis x_i e x_j , e c_i são os coeficientes lineares associados às variáveis x_i .

Para traduzir essa função em um Hamiltoniano quântico, utilizamos as propriedades dos operadores de Pauli z_i . Como sabemos, o operador z_i atua sobre os estados computacionais $|0\rangle$ e $|1\rangle$

da seguinte forma, [86]:

$$z_i |0\rangle = +1 |0\rangle, \quad z_i |1\rangle = -1 |1\rangle.$$

Isso implica que a representação do valor binário x (com $x = 0$ ou $x = 1$) pode ser expressa em termos de z_i como sendo o isomorfismo [172]:

$$\tilde{z}_i = \frac{1 - z_i}{2}. \quad (6.1)$$

Substituindo x_i por $\tilde{z}_i$ na função custo, o Hamiltoniano correspondente é dado por:

$$H_c = \sum_{i,j} \tilde{z}_i Q_{ij} \tilde{z}_j + \sum_i c_i \tilde{z}_i.$$

Ao expandir os termos, obtemos:

$$H_c = \sum_{i,j} Q_{ij} \frac{(1 - Z_i)}{2} \frac{(1 - Z_j)}{2} + \sum_i c_i \frac{(1 - Z_i)}{2}.$$

Esse Hamiltoniano é diagonal na base computacional e seu estado fundamental corresponde ao menor valor da função custo $C(x)$. Em outras palavras, uma vez definido o Hamiltoniano H_c , o objetivo torna-se encontrar o estado quântico $|\mathbf{x}\rangle$ que minimize a expectativa de energia $\langle \mathbf{x} | H_c | \mathbf{x} \rangle$. Por construção, essa minimização garante que a bit-string $\mathbf{x}$, correspondente à solução que minimiza $C(\mathbf{x})$, esteja codificada no estado $|\mathbf{x}\rangle$. Com essa base estabelecida, o próximo passo é mapear o Problema do Caixeiro Viajante no formalismo QUBO, permitindo sua tradução para um Hamiltoniano quântico por meio das técnicas desenvolvidas.

Observação 6.1.1 (Hamiltoniano diagonal na base computacional). *Como lecionam Askery Canabarro et al, [173], pode-se descrever o Hamiltoniano de custo como um operador diagonal na base computacional em termos de combinações de produtos de operadores de Pauli Z_i , como é de uso vernáculo no formalismo de Ising. O caso que está à baila tem que sere pertinente ao problemas de otimização, em particular da classe do formalismo QUBO, em que a função custo $C(x)$, a ser minimizada possui doravante a propriedade*

$$C(x_1, \dots, x_n) = \sum_{i,j=1}^n Q_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n L_i x_i \quad (6.2)$$

Utilizando-se da notação egressa de [173], tem-se que, mapeando as variáveis binárias clássicas

x_i em operadores quânticos na base z , considerando-se $x \in \{0, 1\}$, segue-se que $x_i = |1\rangle\langle 1| = (I - Z_i)/2$, daí obtém-se a propriedade seguinte $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$.

Realizando-se o mapa em questão em todas as variáveis da função custo, obtêm-se o hamiltoniano H_C , que possui agora a propriedade que pode ser descrita a partir de elementos da equação (9.1), como segue

$$H_C|x_1, \dots, x_n\rangle = C(x_1, \dots, x_n)|x_1, \dots, x_n\rangle \quad (6.3)$$

para um estado $|x_1, \dots, x_n\rangle$ da base computacional, quando das implementações práticas, a constante K pode ser suprimida, pois, não altera o autoestado que minimiza o autovalor de H_C .

6.2 Descrição do Problema do Caixeiro Viajante no Formalismo QUBO

Como já enfatizamos, o PCV pode ser representado como um grafo completo ponderado $G = (V, E)$, onde V é o conjunto de vértices representando as cidades e E é o conjunto de arestas que conectam essas cidades, com pesos associados W_{uv} que representam as distâncias ou custos entre cada par de vértices u e v . O objetivo é encontrar um ciclo Hamiltoniano que minimize o custo total, ou seja, visitar todas as cidades exatamente uma vez e retornar à cidade inicial.

No formalismo QUBO, esse problema pode ser traduzido para um Hamiltoniano quântico, que descreve o problema em termos de variáveis binárias e condições de otimização [20]. O Hamiltoniano total é composto por diferentes componentes energéticas que impõem as restrições do PCV.

O Hamiltoniano total é dado por:

$$H = H_A + H_B, \quad (6.4)$$

onde definimos H_A a fim do mesmo garantir as restrições do ciclo Hamiltoniano (garantindo que cada vértice seja visitado exatamente uma vez e que a sequência forme um ciclo válido [20]). O termo H_B , por sua vez, adiciona o peso total das arestas no ciclo, correspondendo ao custo a ser minimizado. Para elucidar este processo, abaixo iremos descrever como podemos incluir as restrições a fim de garantirmos que a otimização gere um circuito válido que contém o menor caminho.

Para descrevermos o problema no formalismo QUBO, começamos definindo uma variável binária $x_{v,j}$, que assume o valor 1 se o vértice v ocupa a j -ésima posição no ciclo, e 0 caso contrário. Aqui, o ciclo refere-se a uma sequência ordenada de vértices que começa e termina no mesmo ponto, visitando cada vértice exatamente uma vez, como requerido por um ciclo Hamiltoniano. A posição j no ciclo representa a ordem em que os vértices são visitados.

Por exemplo, suponha que temos um grafo com 5 vértices: $V = 1, 2, 3, 4, 5$. Uma possível solução para o Problema do Caixeiro Viajante é o ciclo $(1 \rightarrow 3 \rightarrow 5 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 1)$, que começa no vértice 1, visita os vértices na ordem 3, 5, 2, 4, e retorna ao vértice 1. Nesse caso, as posições dos vértices no ciclo seriam:

- Vértice 1 está na posição $j = 1$ e na posição final $j = 6$ (já que o ciclo retorna ao início);
- Vértice 3 está na posição $j = 2$;
- Vértice 5 está na posição $j = 3$;
- Vértice 2 está na posição $j = 4$;
- Vértice 4 está na posição $j = 5$.

As variáveis $x_{v,j}$ para esse ciclo seria igual a 1 para $x_{1,1}$, $x_{3,2}$, $x_{5,3}$, $x_{2,4}$ e $x_{4,5}$ onde, como podemos notar, o vértice v ocupa a j -ésima posição no ciclo. No caso, todas as demais variáveis $x_{v,j}$ são 0, pois os vértices não ocupam essas posições.

Nosso objetivo, na construção do problema, é garantir que cada vértice seja visitado exatamente uma vez e que cada posição no ciclo seja ocupada por apenas um vértice [20]. Sendo assim, vejamos inicialmente como construir as restrições.

6.2.1 Termos de H_A (Restrições do Ciclo)

Como já dissemos, o Hamiltoniano H_A é composto por dois termos principais que garantem as condições de um ciclo Hamiltoniano ¹:

(i) Restrição de cada vértice ser visitado exatamente uma vez

$$H_A^{(1)} = A \sum_{v=1}^N \left(1 - \sum_{j=1}^N x_{v,j} \right)^2, \quad (6.5)$$

¹Na teoria dos grafos, as denotações de ciclo ou circuito hamiltoniano são sinônimas.

onde o termo $\sum_{j=1}^N x_{v,j}$ soma as posições em que o vértice v aparece. A penalidade quadrática força essa soma a ser igual a 1, garantindo que cada vértice seja visitado exatamente uma vez.

(ii) Restrição de cada posição do ciclo ser ocupada por exatamente um vértice

$$H_A^{(2)} = A \sum_{j=1}^N \left(1 - \sum_{v=1}^N x_{v,j} \right)^2, \quad (6.6)$$

onde o termo $\sum_{v=1}^N x_{v,j}$ soma os vértices que ocupam a posição j no ciclo. Essa penalidade garante que cada posição no ciclo seja ocupada por apenas um vértice.

Esses termos combinados garantem que o estado final corresponda a um ciclo Hamiltoniano válido.

6.2.2 Termo de H_B (Minimização do Custo)

O Hamiltoniano H_B incorpora o custo total do ciclo:

$$H_B = B \sum_{u,v=1}^N W_{uv} \sum_{j=1}^N x_{u,j} x_{v,j+1}, \quad (6.7)$$

onde W_{uv} é o peso da aresta (u, v) no grafo e o termo $\sum_{j=1}^N x_{u,j} x_{v,j+1}$ assegura que a contribuição do peso seja somada apenas quando u e v aparecem em posições consecutivas no ciclo. O fator B é escolhido suficientemente pequeno para que a minimização do custo não viole as restrições impostas por H_A .

Vale frisar que para reduzir o número total de variáveis binárias podemos fixar um vértice inicial (por exemplo, o vértice 1) sempre na primeira posição do ciclo. Com isso, o número de variáveis binárias se reduz de N^2 para $(N-1)^2$, uma vez que a posição inicial é fixa.

No formalismo quântico, essas variáveis binárias $x_{v,j}$ são mapeadas para operadores quânticos em qubits. O estado fundamental (menor valor de energia) do Hamiltoniano total H corresponde à solução do PCV, onde a bit-string associada aos operadores quânticos representa a sequência do ciclo Hamiltoniano que minimiza o custo. Essa formulação, como mostraremos na sequência, permite que o problema do PCV seja resolvido em dispositivos quânticos, seja utilizando computadores digitais, através de algoritmos variacionais, como em computadores analógicos baseado-se em *quantum annealing*.

6.3 Codificando em um arranjo de qubits

Fazendo uso da transcrição apresentada na Seção 6.1, onde cada variável binária é codificada no operador de Pauli z , podemos transcrever o Hamiltoniano acima na sua forma final. Sendo assim, fixando o vértice inicial e tomando o isomorfismo, análogo a (6.1), tem-se

$$x_{v,j} = \frac{\mathbb{1} - z_{v,j}}{2}$$

nas equações acima temos que $H_A^{(1)}$ é dado por:

$$H_A^{(1)} = A \sum_{v=1}^N \left(1 - \sum_{j=0}^{n-1} \frac{1 - z_{v,j}}{2} \right)^2 \quad (6.8)$$

de forma que expandindo o quadrado temos:

$$H_A^{(1)} = A \sum_{v=1}^N \left[\frac{n^2}{4} \mathbb{1} - \frac{(2n-4)}{4} \sum_{j=1}^N z_{v,j} + \frac{1}{4} \sum_{j=1}^N \sum_{s=1}^N z_{v,j} z_{v,s} \right]. \quad (6.9)$$

A restrição $H_A^{(2)}$, que infere a restrição de que cada posição do ciclo possa ser ocupada por exatamente um vértice é reescrito como:

$$H_A^{(2)} = A \sum_{j=1}^N \left(1 - \sum_{v=1}^N \frac{1 - z_{v,j}}{2} \right)^2 \quad (6.10)$$

de forma que expandindo o quadrado obtemos:

$$H_A^{(2)} = A \sum_{j=1}^N \left[\frac{n^2}{4} \mathbb{1} - \frac{(2n-4)}{4} \sum_{v=1}^N z_{v,j} + \frac{1}{4} \sum_{v=1}^N \sum_{s=1}^N z_{v,j} z_{s,j} \right]. \quad (6.11)$$

Finalmente, o custo total do ciclo fica:

$$H_B = B \sum_{u,v=1}^N \sum_{j=1}^N W_{uv} \left(\frac{\mathbb{1}}{4} - \frac{z_{u,j}}{4} - \frac{z_{v,j+1}}{4} + \frac{z_{u,j} z_{v,j+1}}{4} \right). \quad (6.12)$$

Assim, o Hamiltoniano total para o PCV, que inclui o custo H_B e as penalidades $H_A^{(1)}$ e $H_A^{(2)}$ é dado por

$$H = H_B + H_A^{(1)} + H_A^{(2)} \quad (6.13)$$

Este Hamiltoniano completo descreve o PCV em termos de operadores quânticos, minimizando a

soma das distâncias entre as cidades, enquanto aplica penalidades para garantir que cada cidade seja visitada exatamente uma vez e que de cada posição do ciclo seja ocupada por exatamente um vértice.

Com o Hamiltoniano definido, o próximo passo nesta pesquisa será a aplicação de algoritmos quânticos, como o *Variational Quantum Eigensolver* (VQE), a fim de encontrar os estados fundamentais desse Hamiltoniano. Esses algoritmos serão utilizados para explorar as possibilidades de resolução do PCV em computadores quânticos. No entanto, essa abordagem apresenta desafios significativos, principalmente devido ao alto custo de recursos, já que o número de qubits necessários cresce quadraticamente com o número de cidades, ou seja, aumenta com n^2 , onde n é o número de cidades do problema. Vale enfatizar que, para mitigar essas limitações, na Sec. (8.3.2) apresentaremos brevemente a estratégia de codificação em múltiplas bases, uma abordagem que visa otimizar a utilização de recursos quânticos, e que será também implementada até o final do desenvolvimento deste projeto de pesquisa.

6.4 Descrição Simplificada do Problema do Caixeiro Viajante no Formalismo QUBO para 4 e 5 cidades

No caso de um número pequeno de cidades, como 4 ou 5, é possível reformular o problema do Caixeiro Viajante de forma mais eficiente, reduzindo significativamente a quantidade de qubits necessários. Ao invés de utilizar a abordagem convencional baseada em n^2 variáveis, onde cada variável binária $x_{v,j}$ representa a presença de uma cidade v em uma posição j do ciclo, adotamos uma estratégia onde cada variável binária representa diretamente a existência de uma *aresta* no grafo. Essa simplificação é possível porque, para um número pequeno de cidades, não há formação de subciclos que inviabilizam a solução correta.

A formulação é de tal maneira que a função custo é definida pela soma das arestas do grafo. As restrições fundamentais para garantir um ciclo Hamiltoniano válido são:

- A soma total das arestas selecionadas deve ser igual a n , onde n é o número de cidades do problema.
- Cada cidade deve estar conectada exatamente a duas outras cidades, garantindo que o percurso seja um ciclo fechado.

Matematicamente temos que:

$$\sum_{i,j} x_{ij} = n \quad (6.14)$$

$$\sum_j x_{ij} = 2, \quad \forall i \quad (6.15)$$

onde x_{ij} é uma variável binária que assume valor 1 se a aresta (i, j) faz parte do ciclo e 0 caso contrário.

6.4.1 Hamiltoniano do Problema

Como já vimos, a formulação do problema no formalismo QUBO exige a construção de um Hamiltoniano que minimize o custo total do caminho, fazendo com que este se sujeite às restrições descritas acima. O Hamiltoniano total pode ser expresso como:

$$H = H_C + H_R, \quad (6.16)$$

em que H_C representa o custo do percurso e H_R impõe as restrições necessárias para garantir que o resultado seja um ciclo Hamiltoniano.

O termo de custo é simplesmente a soma dos pesos das arestas do caminho percorrido:

$$H_C = \sum_{i,j} w_{ij} x_{ij}, \quad (6.17)$$

neste caso, w_{ij} representa o peso associado à aresta (i, j) , que pode ser a distância entre as cidades. O termo de restrição, por sua vez, a fim de garantir que a solução represente um ciclo válido, impõe as seguintes penalidades:

$$H_R = A \left(\sum_{i,j} x_{ij} - n \right)^2 + B \sum_i \left(\sum_j x_{ij} - 2 \right)^2, \quad (6.18)$$

onde A e B , [20] são coeficientes de penalidade suficientemente grandes² para garantir que as restrições sejam satisfeitas.

Essa abordagem reduz a quantidade de variáveis binárias e, consequentemente, o número de qubits necessários para resolver o problema. Diferentemente da formulação tradicional, que cresce

²No mesmo sentido que se dá a esta expressão em análise, portanto, refere-se a um valor ou índice que, após atingido, dá garantias que uma determinada propriedade ou condição seja satisfeita para todos os valores ou índices maiores ou iguais a ele.

com n^2 , aqui trabalhamos com um número reduzido de variáveis, o que melhora a viabilidade de implementação em hardware quântico. De fato, visto que cada variável está associada a uma aresta, o número de variáveis binárias nessa nova formulação é $\frac{n(n-1)}{2}$. Com essa nova formulação, buscamos realizar uma análise qualitativa do método, explorando suas limitações e desafios, mesmo em instâncias simples do Problema do Caixeiro Viajante. O objetivo é utilizar essa abordagem como um exemplo simplificado para identificar as principais dificuldades presentes na otimização variacional. O próximo passo será a implementação dessa formulação em algoritmos variacionais, investigando sua eficácia na obtenção do estado fundamental do Hamiltoniano associado ao problema.

6.5 Conclusões e Síntese Capítulo 6

Neste Capítulo, vimos o como proceder para se mapear o PCV em hamiltonianos quânticos, a função custo e como se denota matematicamente. Naturalmente também fez-se a descrição do PCV no formalismo QUBO, impondo-se as restrições que foram descritas no capítulo anterior. Ainda neste capítulo, utilizou-se um modelo mais simplificado do PCV descrito no formalismo QUBO para a resolução em 4 e 5 nós, não seria então utilizado o formalismo descrito em Lucas, [20], mas, uma simplificação que tornasse possível realizar um estudo propedêutico sobre o uso das técnicas envolvendo o formalismo QUBO para estes problemas, já preparando para o uso do algoritmo híbrido VQE, que será escopo do próximo capítulo, em que se descreverá com detalhes este algoritmo.

Capítulo 7

Métodos de Otimização Quântica

7.1 Algoritmo VQE

O algoritmo *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) é amplamente utilizado em química quântica, simulações quânticas e problemas de otimização, sendo este último o foco desta pesquisa. Trata-se de um algoritmo híbrido que busca encontrar o estado fundamental de um determinado sistema físico.

Dada uma estimativa inicial, também denominada *Ansatz*¹, o processador quântico calcula o valor esperado de um observável – geralmente o Hamiltoniano do sistema – enquanto um otimizador clássico ajusta os parâmetros da estimativa para minimizar esse valor. O algoritmo se fundamenta no método variacional da mecânica quântica e foi originalmente proposto por Alberto Peruzzo, Alán Aspuru-Guzik, Jeremy O’Brien, Jarrod McClean, Man-Hong Yung, Peter Shadbolt, Xiao-Qi Zhou e Peter J. Love [174].

Além de sua relevância em química quântica e simulações, o VQE tem sido explorado em algoritmos híbridos aplicados ao aprendizado de máquina quântico e em uma ampla gama de problemas de otimização. Em particular, como vimos no Cap. (6), problemas de otimização combinatória com variáveis binárias podem ser formulados como Hamiltonianos, onde a solução ótima do problema corresponde ao estado fundamental do sistema. Isso torna o VQE uma ferramenta promissora para resolver problemas que podem ser mapeados para modelos baseados na mecânica quântica, ampliando suas aplicações para diversas áreas.

O VQE pode ser dividido em três etapas: (i) a definição do Ansatz; (ii) a medição e o cálculo do valor esperado; (iii) a otimização clássica. Abaixo, para maior clareza, iremos descrever em

¹Em alemão, possui vários significados, mas, talvez **suposição** seja o que mais se aproxime no contexto.

mais detalhes cada uma destas etapas.

7.1.1 A Definição do *Ansatz*

A escolha do *Ansatz* é um dos aspectos mais críticos do algoritmo VQE, pois impacta diretamente sua capacidade de encontrar uma boa aproximação para o estado fundamental do sistema em questão. No contexto do VQE, o *Ansatz* é representado por um circuito quântico parametrizado, cujos parâmetros variáveis são ajustados iterativamente por um otimizador clássico. A construção do *Ansatz* deve equilibrar expressividade² e eficiência computacional: ele precisa ser suficientemente flexível para representar o estado fundamental exato (ou uma boa aproximação), mas não deve introduzir uma quantidade excessiva de parâmetros que comprometa a convergência do algoritmo.

Uma estratégia amplamente utilizada é o *Ansatz* de eficiência de hardware (*hardware-efficient Ansatz*), projetado para ser implementado com maior facilidade em dispositivos quânticos ruidosos (*Noisy Intermediate-Scale Quantum* – NISQ). Esse tipo de *Ansatz* é composto por uma sequência de portas rotacionais de um único qubit combinadas com portas de emaranhamento de dois qubits. A profundidade do circuito, definida como o maior número de portas em sequência em qualquer caminho do circuito, é um parâmetro crucial, pois circuitos excessivamente profundos podem ser inviáveis devido à presença de ruído quântico.

Um desafio importante na definição do *Ansatz* é evitar a ocorrência dos chamados platôs estéreis (*barren plateaus*), onde a função de custo se torna quase constante em amplas regiões do espaço paramétrico, tornando o treinamento do modelo ineficaz. No entanto, esse não será um problema relevante em nossos estudos, visto que estaremos lidando com problemas envolvendo poucos qubits e circuitos de baixa profundidade.

Por outro lado, um problema mais relevante em nosso contexto é a presença de mínimos locais na função de custo. Diferente dos platôs estéreis, onde a otimização se torna ineficiente devido à ausência de gradiente, os mínimos locais podem aprisionar o algoritmo em soluções subótimas, dificultando a convergência para o estado fundamental verdadeiro. Como iremos demonstrar em nossos estudos, esse é um problema presente mesmo em instâncias pequenas e exige a escolha criteriosa de um otimizador clássico adequado para melhorar a performance do VQE.

Portanto, a definição de um *Ansatz* eficiente envolve um compromisso entre expressividade e eficiência, levando em consideração tanto a capacidade de representação do estado fundamental

²A expressividade de um *Ansatz* se refere à sua capacidade de representar uma ampla gama de estados quânticos no espaço de Hilbert

quanto as limitações computacionais e experimentais da plataforma quântica utilizada. Além disso, a escolha do *Ansatz* deve ser acompanhada de uma estratégia de otimização robusta para mitigar problemas como mínimos locais, garantindo que o algoritmo alcance soluções de alta qualidade.

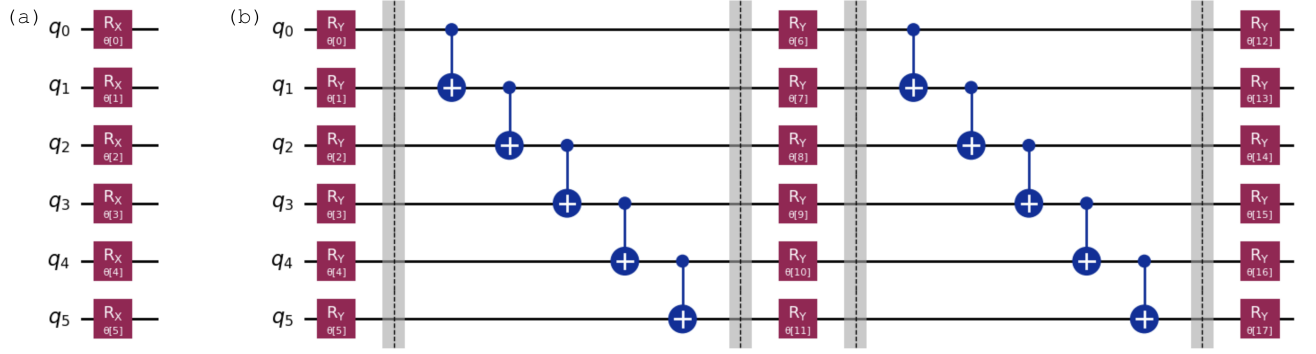


Figura 7.1: Em (a) temos o *Ansatz* composto por rotações locais $R_x(\vec{\theta})$, onde cada qubit recebe uma porta R_x parametrizada. Esse modelo não inclui emaranhamento e é utilizado para avaliar a contribuição das transformações locais no desempenho do VQE. Em (b) temos o *Ansatz TwoLocal* de 2 camadas com conectividade linear, contendo camadas alternadas de portas de rotação $R_y(\vec{\theta})$ e portas CNOT dispostas em uma estrutura linear. Esse modelo introduz emaranhamento no circuito e é amplamente utilizado em algoritmos híbridos.

7.1.2 A medição e o cálculo do valor esperado

No VQE, a avaliação da função de custo (tipicamente a energia do sistema físico) é realizada através da medição do valor esperado do Hamiltoniano $\hat{H}$ no estado preparado pelo *Ansatz*. Seja um estado parametrizado $|\psi(\theta)\rangle$ resultado do circuito, o valor esperado da energia é dado por:

$$E(\theta) = \langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle = \sum_i \alpha_i \langle \psi(\theta) | \hat{P}_i | \psi(\theta) \rangle, \quad (7.1)$$

nesta situação $\hat{H}$ é decomposto como uma soma ponderada de termos da forma $\hat{P}_i$ representados pelos operadores de Pauli, e os coeficientes α_i são valores reais determinados pelo problema em questão.

Em grande parte dos nossos estudos, trabalharemos com Hamiltonianos do tipo Ising, os quais podem ser escritos genericamente como:

$$\hat{H} = \sum_i h_i Z_i + \sum_{i < j} J_{ij} Z_i Z_j. \quad (7.2)$$

Nessa formulação, os operadores envolvidos são exclusivamente do tipo Z , permitindo que todas as medições sejam realizadas diretamente na base computacional. Como todos os termos do Hamiltoniano de Ising comutam entre si, podemos medir toda a estrutura simultaneamente, otimizando a obtenção do valor esperado da energia e reduzindo significativamente o custo computacional do VQE.

No entanto, na parte final de nossos estudos, nós vamos lidar com o que chamamos de codificação em múltiplas bases e, nesse caso, a estratégia precisa ser modificada. Nessa abordagem, as variáveis do problema são mapeadas para diferentes eixos da esfera de Bloch, exigindo medições em bases distintas. Em particular, quando utilizarmos essa técnica, será necessário medir valores esperados de σ^x e σ^z para cada qubit, pois a função de custo associada depende dessas componentes. Para implementar essas medições em um computador quântico, devemos aplicar transformações de base antes da leitura, da seguinte maneira:

- Para medir um qubit na base X , aplica-se uma porta de Hadamard antes da medição.
- Para medir um qubit na base Y , aplica-se uma porta $S^\dagger$ seguida de uma porta de Hadamard antes da medição.

Dessa forma, a escolha da estratégia de medição dependerá do tipo de codificação. Quando trabalharmos com Hamiltonianos do tipo Ising, a medição direta na base computacional será suficiente. Já para os casos em que utilizarmos a codificação em múltiplas bases, será necessário realizar medições em eixos distintos, aplicando transformações apropriadas para garantir a correta extração da informação necessária.

A correta implementação da estratégia de medição é, naturalmente, essencial para a eficiência do VQE, pois impacta diretamente a precisão dos resultados e a viabilidade experimental do algoritmo. A escolha entre medições na base computacional ou medições em múltiplas bases dependerá da estrutura do problema e dos benefícios que cada método proporciona.

7.1.3 A Otimização Clássica

A etapa de otimização clássica no VQE consiste em encontrar os parâmetros ótimos do *Ansatz* que minimizam a energia esperada do Hamiltoniano do sistema. Esse processo se baseia no princípio variacional da mecânica quântica, que estabelece que a energia do estado fundamental E_0 de um Hamiltoniano $\hat{H}$ é sempre um limitante inferior para o valor esperado da energia de

qualquer estado de teste $|\psi(\theta)\rangle$, [175]:

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle}{\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle}. \quad (7.3)$$

No contexto do VQE, a função de custo a ser minimizada corresponde ao valor esperado do Hamiltoniano $\hat{H}$ no estado preparado pelo circuito quântico parametrizado:

$$E(\vec{\theta}) = \langle \psi(\vec{\theta}) | \hat{H} | \psi(\vec{\theta}) \rangle. \quad (7.4)$$

A minimização de $E(\vec{\theta})$ é realizada iterativamente através de um algoritmo clássico de otimização, ajustando os parâmetros do *Ansatz* para aproximar a melhor solução possível. O objetivo é encontrar o conjunto ótimo de parâmetros $\vec{\theta}^*$ que minimize a energia:

$$\vec{\theta}^* = \underset{\vec{\theta}}{\operatorname{argmin}} E(\vec{\theta}). \quad (7.5)$$

Consequentemente, o estado preparado pelo circuito quântico converge para uma aproximação do estado fundamental do Hamiltoniano:

$$|\psi(\vec{\theta}^*)\rangle \approx |\psi_0\rangle. \quad (7.6)$$

A otimização desses parâmetros é realizada por métodos clássicos de minimização de funções multivariáveis. Dentre os algoritmos mais utilizados, podemos citar:

- **Métodos baseados em gradiente:** como o *gradiente descendente* e suas variantes, incluindo Adam e *L-BFGS-B*, que atualizam os parâmetros seguindo a direção do maior decréscimo da função custo.
- **Métodos livres de gradiente:** como *COBYLA* e *SPSA*, que são particularmente úteis em ambientes ruidosos, onde o cálculo explícito do gradiente pode ser inviável.
- **Híbridos:** combinações de técnicas clássicas e heurísticas para melhorar a robustez da otimização em problemas de difícil convergência.

A exigência fundamental para traduzir esse problema de minimização em uma execução viável em um computador quântico é definir um *Ansatz* que possa ser implementado na forma de um

circuito quântico parametrizado. Formalmente, o estado preparado pode ser escrito como:

$$|\psi(\vec{\theta})\rangle = U(\vec{\theta})|0\rangle^{\otimes n}, \quad (7.7)$$

onde $U(\vec{\theta})$ é uma unidade parametrizada aplicada ao estado inicial de n qubits $|0\rangle^{\otimes n}$, com os parâmetros $\vec{\theta}$ variando no intervalo $(-\pi, \pi]$. O problema de otimização do VQE pode, então, ser expresso como:

$$E_v = \min_{\vec{\theta}} \langle \mathbf{0} | U^\dagger(\vec{\theta}) \hat{H} U(\vec{\theta}) | \mathbf{0} \rangle. \quad (7.8)$$

onde $|\mathbf{0}\rangle \equiv |0\rangle^{\otimes n}$. A função de custo associada a essa otimização, representada pela Eq. (7.8), é diretamente análoga às funções de custo usadas em aprendizado de máquina, onde o objetivo é minimizar uma métrica específica através do ajuste de parâmetros.

Como já enfatizamos, em nossos estudos iremos trabalhar majoritariamente com Hamiltonianos do tipo Ising, que podem ser escritos na forma:

$$\hat{H} = \sum_i h_i Z_i + \sum_{i < j} J_{ij} Z_i Z_j. \quad (7.9)$$

Dado que esses Hamiltonianos são compostos exclusivamente por operadores de Pauli-Z, seu valor esperado pode ser obtido diretamente a partir de medições na base computacional, simplificando a execução do algoritmo. No entanto, ao explorarmos a técnica de codificação em múltiplas bases, precisaremos lidar com Hamiltonianos contendo termos adicionais de Pauli-X, exigindo otimização conjunta de diferentes observáveis.

Portanto, a otimização clássica é um dos aspectos mais importantes do VQE, pois a escolha do método de otimização influencia diretamente sua eficiência e precisão. Como mostraremos em nossos estudos, dificuldades como mínimos locais podem afetar a convergência do algoritmo, e, como a solução exata sempre está localizada no mínimo global da função de custo, o uso de algoritmos eficientes se torna de suma importância. A seleção cuidadosa do otimizador clássico adequado para cada caso é essencial para garantir que o VQE seja capaz de encontrar boas aproximações para o estado fundamental do Hamiltoniano.

A fim de concluir essa seção, abaixo apresentamos um resumo do pipeline do algoritmo.

7.1.4 Pipeline do Algoritmo

Para resumir a implementação do VQE, traçamos a seguir um pipeline do algoritmo, destacando suas principais etapas. A Figura 7.2 ilustra esse fluxo, evidenciando a interação entre a subrotina quântica e a otimização clássica.

- **Definição do Hamiltoniano:** O primeiro passo consiste em definir o Hamiltoniano $\hat{H}$ do sistema, que pode descrever, por exemplo, um problema de otimização combinatória ou um modelo físico específico. Em nossos estudos, utilizamos majoritariamente Hamiltonianos do tipo Ising, cuja estrutura permite medições diretas na base computacional.
- **Codificação do Problema:** A escolha da representação do Hamiltoniano e dos operadores influencia diretamente a eficiência do algoritmo. Como veremos, no caso da codificação em múltiplas bases, é necessário incluir medições em diferentes eixos da esfera de Bloch.
- **Preparação do Estado (*Ansatz*):** O estado inicial é preparado a partir de um circuito quântico parametrizado $U(\vec{\theta})$, que depende de um conjunto de parâmetros ajustáveis $\vec{\theta}$. A escolha do *Ansatz* afeta tanto a expressividade do modelo quanto sua treinabilidade.
- **Medição do Valor Esperado:** O circuito parametrizado é executado e os qubits passam pelo processo de medição, obter-se-á então, o valor denominado valor esperado, denotado por $\langle \hat{H} \rangle(\vec{\theta})$. Caso seja necessária a medição em bases diferentes, são aplicadas portas de Clifford antes da leitura.
- **Otimização Clássica:** Um otimizador clássico ajusta os parâmetros $\vec{\theta}$ iterativamente, buscando minimizar a energia esperada. A escolha do método de otimização é crucial, pois a função de custo pode conter mínimos locais e platôs estéreis.
- **Convergência e Solução Aproximada:** O processo é repetido até a convergência dos parâmetros, garantindo que o estado final $|\psi(\vec{\theta}^*)\rangle$ seja uma boa aproximação do estado fundamental do sistema.

Esse pipeline combina processamento quântico e otimização clássica de forma iterativa, explorando a vantagem do paralelismo quântico na avaliação de estados e a eficiência dos algoritmos clássicos na atualização de parâmetros.

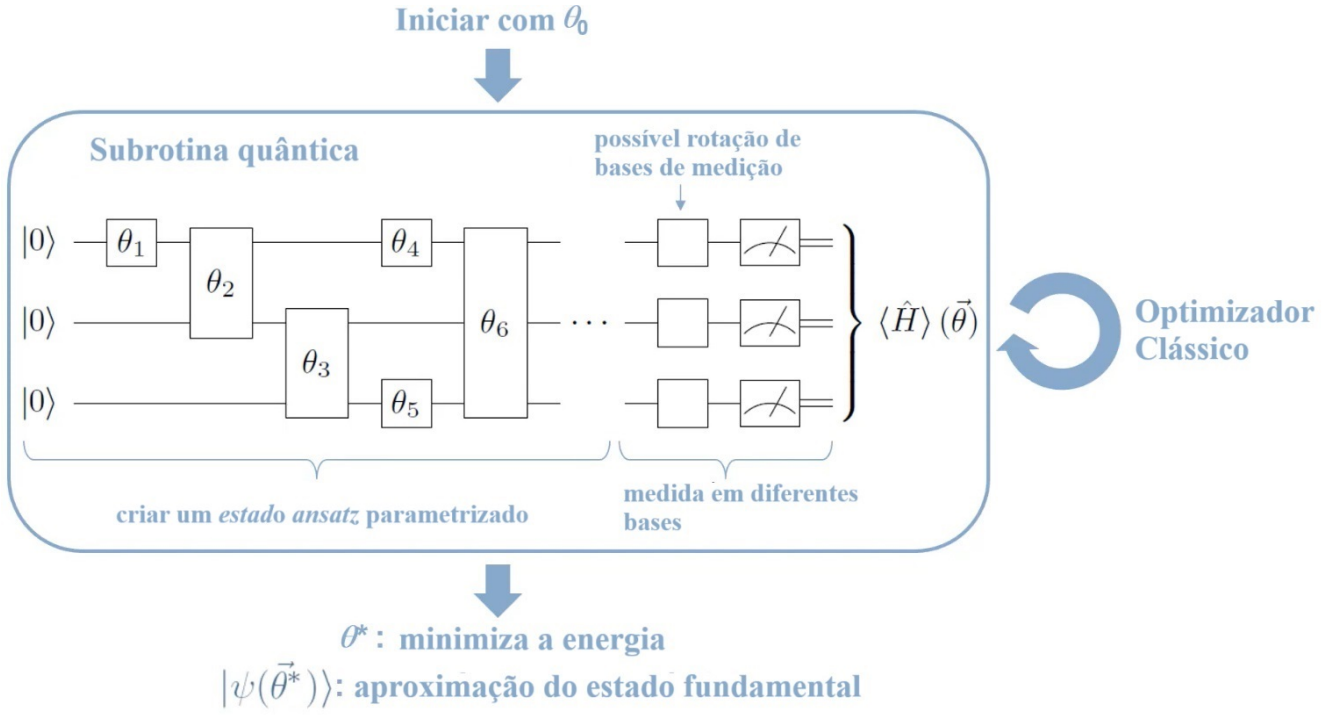


Figura 7.2: Pipeline do algoritmo VQE, em forma de diagrama.

7.2 Exemplificando para o caso de 4 cidades

Nesta seção, ilustramos a formulação do Problema do Caixeiro Viajante para o caso específico de 4 cidades. Diferente da abordagem convencional, onde a codificação exigiria n^2 variáveis binárias, aqui representamos o problema utilizando um número reduzido de variáveis, explorando diretamente as arestas do grafo. Como já enfatizamos, com essa formulação, cada qubit representa a presença ou ausência de uma determinada aresta, reduzindo a dimensionalidade do problema.

7.2.1 Codificação do Problema

Dado um conjunto de 4 cidades, podemos modelar sua conexão como um grafo completo com 4 vértices e 6 arestas. As variáveis binárias x_{ij} representam a ativação ou não de cada aresta (i, j) no circuito do caixeiro viajante, seja a *bump function*:

$$x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se a aresta } (i, j) \text{ estiver presente no ciclo} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

O número total de arestas em um grafo completo de 4 vértices é dado por:

$$V(4) = \frac{4(4-1)}{2} = 6.$$

Portanto, precisamos de 6 qubits, cada um associado a uma das 6 arestas possíveis.

7.2.2 Restrições do Problema

Como vimos, para garantir que a solução gerada represente um ciclo válido, deve se impor as seguintes restrições:

- **Restrição de ciclo:** O ciclo do caixeiro viajante deve percorrer exatamente 4 arestas, garantindo que todas as cidades sejam visitadas uma única vez:

$$x_{01} + x_{02} + x_{03} + x_{12} + x_{13} + x_{23} = 4. \quad (7.10)$$

- **Restrição de conectividade:** Cada cidade deve estar conectada a exatamente duas outras cidades, assegurando que o percurso forme um ciclo válido:

$$x_{01} + x_{02} + x_{03} = 2, \quad (7.11)$$

$$x_{01} + x_{12} + x_{13} = 2, \quad (7.12)$$

$$x_{02} + x_{12} + x_{23} = 2, \quad (7.13)$$

$$x_{03} + x_{13} + x_{23} = 2. \quad (7.14)$$

Dessa forma, evitamos subciclos e garantimos que a solução represente um trajeto único percorrendo todas as cidades.

7.2.3 Hamiltoniano do Problema

A formulação do problema em termos do formalismo de Ising permite representar as restrições e a função custo na forma de um Hamiltoniano. De modo geral, podemos expressar o Hamiltoniano na forma:

$$H = \sum_{i,j} C_{ij} x_{ij} + \lambda \sum_{\text{restrições}} (\text{violação da restrição})^2. \quad (7.15)$$

Após a codificação, o Hamiltoniano assume a forma típica do modelo de Ising com 6 qubits:

$$H = \sum_i h_i Z_i + \sum_{i<j} J_{ij} Z_i Z_j, \quad (7.16)$$

onde os coeficientes h_i e J_{ij} são ajustados para penalizar soluções inválidas e minimizar o custo do percurso.

7.2.4 Cálculo do Valor Esperado e Minimização da Energia

Uma vez formulado o Hamiltoniano no modelo de Ising, o próximo passo é calcular o valor esperado da energia para um estado quântico específico. Dado um estado parametrizado $|\psi(\theta)\rangle$ gerado por um circuito quântico variacional, a energia associada a esse estado é dada por:

$$E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle = \sum_i h_i \langle \psi(\theta) | Z_i | \psi(\theta) \rangle + \sum_{i<j} J_{ij} \langle \psi(\theta) | Z_i Z_j | \psi(\theta) \rangle. \quad (7.17)$$

O cálculo do valor esperado de cada termo do Hamiltoniano requer a medição dos operadores de Pauli correspondentes. Como os computadores quânticos medem diretamente na base computacional (Z), os termos do Hamiltoniano que contêm apenas Z_i ou $Z_i Z_j$ podem ser medidos diretamente.

Como já enfatizamos, a ideia central do algoritmo VQE é encontrar os parâmetros $\vec{\theta}$ que minimizam $E(\vec{\theta})$, buscando aproximar o estado fundamental do Hamiltoniano. Isso é feito iterativamente através de um otimizador clássico, que ajusta os parâmetros do circuito de acordo com a seguinte estratégia:

$$\theta^* = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} E(\vec{\theta}). \quad (7.18)$$

Ou seja, os parâmetros θ são ajustados para minimizar a energia do sistema, garantindo que o estado final preparado pelo circuito seja o mais próximo possível do verdadeiro estado fundamental do Hamiltoniano.

Essa abordagem combina a flexibilidade dos circuitos quânticos variacionais com a capacidade dos otimizadores clássicos de explorar o espaço de parâmetros² de forma eficiente. A minimização do valor esperado da energia é fundamental para garantir que a solução encontrada represente de fato a melhor configuração para o problema do Caixeiro Viajante dentro dessa formulação.

A escolha da base na qual as medições são realizadas tem um impacto significativo na eficiência

²Espaço de todos os valores de parâmetros possíveis que dão a um modelo matemático particular e geralmente trata-se de um subconjunto do espaço euclidiano de dimensão finita

do cálculo do valor esperado. Até agora, consideramos apenas medições na base computacional (Z). No entanto, algumas formulações mais avançadas exploram múltiplas bases para melhorar a expressividade dos estados quânticos e a eficiência na otimização dos parâmetros. Essa técnica, conhecida como codificação em múltiplas bases, pode ser incorporada para tornar o processo mais eficiente e minimizar os recursos físicos necessários. Na próxima seção, discutiremos essa abordagem e sua aplicação ao Problema do Caixeiro Viajante.

7.3 Conclusões e Síntese do Capítulo 7

No Capítulo que apresentamos, discurremos basicamente sobre o funcionamento do VQE, utilizado *in loco* para problemas de otimização. Trata-se de um algoritmo híbrido que utiliza computadores clássicos e quânticos para encontrar o estado fundamental de um determinado sistema físico. Iniciado, por um circuito sugestão ou *Ansatz*, o processador quântico calcula o valor esperado do sistema em relação a um observável, geralmente o hamiltoniano, e um otimizador clássico é usado para melhorar a sugestão inicial. Em suma, baseia-se o algoritmo no método variacional da mecânica quântica.

Fora originalmente proposto em 2014, com os autores correspondentes Alberto Peruzzo, Alán Aspuru-Guzik e Jeremy O’Brien, [176]. O algoritmo também encontrou aplicações em aprendizado de máquina quântico e foi posteriormente fundamentado por algoritmos híbridos gerais entre computadores quânticos e clássicos. É um exemplo de um algoritmo quântico de escala intermediária com ruído NISQ, [177]. Em suma, o objetivo do VQE é encontrar um conjunto de operações quânticas que prepare o estado de menor energia de uma aproximação a algum observável, não obstante, o único requisito estrito para a representação de um observável seja sua eficiência na estimativa de seus valores esperados, geralmente é mais simples se o operador tiver uma expressão compacta ou simples em termos de operadores de Pauli ou produtos tensoriais destes operadores. Exemplificou-se também com um problema com 4 nós.

Capítulo 8

Codificação em Múltiplas Bases (MBE)

O formalismo de *Multibasis Encoding* tem se mostrado especialmente eficaz na resolução de problemas de otimização combinatória do tipo *MaxCut*. Essa eficiência decorre de sua capacidade de explorar múltiplas bases de medição em qubits individuais, reduzindo significativamente os recursos quânticos necessários e ampliando a expressividade de circuitos rasos. Diante disso, iniciaremos este capítulo com uma apresentação detalhada do problema *MaxCut*, destacando sua formulação e relevância no contexto de algoritmos variacionais. Em seguida, demonstraremos como qualquer problema QUBO pode ser eficientemente transformado em um problema equivalente de *MaxCut*. Essa transformação é importante, pois permite que a metodologia MBE seja aplicada de forma geral a uma ampla classe de problemas de otimização. Com essa base estabelecida, prosseguiremos com a descrição do MBE, explorando suas principais características, os mecanismos de codificação multibase e as nuances que tornam esse algoritmo uma ferramenta bastante promissora para a computação quântica.

8.1 O Algoritmo *MaxCut*

O problema *MaxCut* é uma tarefa clássica de particionamento em grafos não direcionados, formalmente definidos como $G = (V, A)$, onde V representa o conjunto de vértices (ou nós), e A representa o conjunto de arestas conectando pares de vértices. No contexto da figura 8.1, os vértices são ilustrados como esferas azuis, e as arestas como linhas pretas que os conectam.

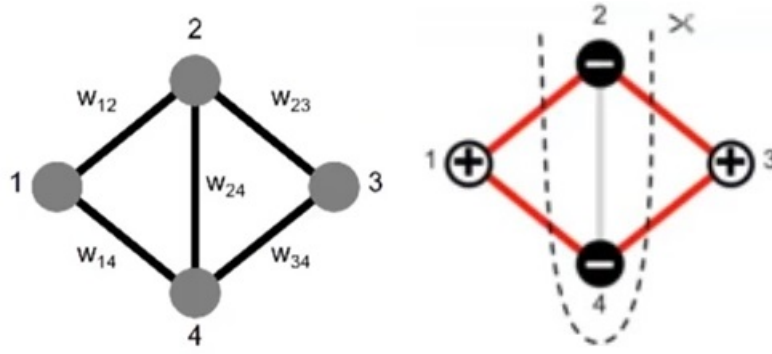


Figura 8.1: **Esquerda:** Representação gráfica do Algoritmo *MaxCut*. Grafo com seus nós e cada aresta com seu peso denotado por w_{ij} , sendo $w_{ij} > 0$ e $w_{ij} = w_{ji}$. **Direita:** Grafo com arestas cortadas, com os nós na parte inferior com o sinal de adição e as superiores com o sinal de subtração, assim dispostos . Fonte: Autor.

A ideia central do *MaxCut* é particionar o conjunto de vértices em dois subconjuntos disjuntos, de modo que a soma dos pesos das arestas entre vértices de subconjuntos opostos seja maximizada. Para isso, atribuímos a cada vértice um valor binário $x_i \in \{-1, 1\}$: por exemplo, $x_i = +1$ para os vértices da parte inferior do grafo e $x_i = -1$ para os da parte superior, como ilustrado na figura. A relação entre pares de vértices pode então ser expressa por:

$$x_i x_j = \begin{cases} -1, & \text{se } x_i \neq x_j \text{ (vértices em subconjuntos distintos)} \\ 1, & \text{se } x_i = x_j \text{ (vértices no mesmo subconjunto)} \end{cases} \quad (8.1)$$

Com isso, define-se uma função indicadora (ou *bump function*) que determina se uma aresta $\{i, j\}$ foi cortada:

$$\frac{1 - x_i x_j}{2} = \begin{cases} 1, & \text{se } x_i \neq x_j \text{ (aresta cortada)} \\ 0, & \text{se } x_i = x_j \text{ (aresta não cortada)} \end{cases} \quad (8.2)$$

Assim, o objetivo do problema *MaxCut* é encontrar uma atribuição ótima para os valores de x_i de modo que a soma dos pesos das arestas cortadas seja máxima. Qualquer tal atribuição define um *corte* no grafo. Quando os pesos w_{ij} são positivos e associados a cada aresta, temos o chamado *MaxCut ponderado*. O problema admite duas formulações distintas:

- Decisão (NP-completo): decidir se existe um corte de valor pelo menos c ;
- Otimização (NP-difícil): encontrar o corte de valor máximo possível.

Adotamos aqui a formulação de otimização, conhecida como $MaxCut(G)$, cuja função objetivo

quadrática binária, derivada diretamente da equação (8.2), é expressa por:

$$\text{maximize } \frac{1}{2} \sum_{j < i} w_{ij} (1 - x_i x_j) \quad (8.3)$$

Essa formulação é particularmente conveniente para técnicas de otimização quântica, incluindo algoritmos variacionais como o *VQE* e a codificação em múltiplas bases (*MBE*).

Compreendida a formulação do problema *MaxCut*, passamos agora a investigar como problemas de otimização no formato QUBO podem ser convertidos em instâncias equivalentes de *MaxCut*, permitindo a aplicação eficiente de algoritmos variacionais, como a codificação em múltiplas bases.

8.2 Conversão do Formalismo QUBO em *Maxcut*

A equivalência entre problemas do tipo QUBO e o *MaxCut* já é conhecida há um tempo [178,179]. A seguir demonstraremos em detalhes a derivação algébrica dessa equivalência seguindo os passos dados por [178].

Consideramos o problema QUBO sobre n variáveis binárias $x_i \in \{0, 1\}$, $i = 1, \dots, n$, definido por

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n q_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n c_i x_i. \quad (8.4)$$

Os coeficientes q_{ij} descrevem as interações quadráticas fora da diagonal, ao passo que possíveis pesos lineares c_i incorporam tanto contribuições originais quanto termos diagonais q_{ii} . Fazemos explicitamente

$$c_i := q_{ii} + c_i^{(\text{original})}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (8.5)$$

Assim, toda informação diagonal fica absorvida nos termos lineares.

Para evidenciar a estrutura de *MaxCut*, transformamos cada variável binária em uma variável de *spin* via

$$s_i = 2x_i - 1 \quad \Longleftrightarrow \quad x_i = \frac{s_i + 1}{2}, \quad s_i \in \{-1, +1\}. \quad (8.6)$$

Substituindo x_i em (8.4), obtemos

$$f(x(s)) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n q_{ij} \left(\frac{s_i + 1}{2} \right) \left(\frac{s_j + 1}{2} \right) + \sum_{i=1}^n c_i \frac{s_i + 1}{2}. \quad (8.7)$$

Expandimos cuidadosamente cada termo e mantemos, na mesma expressão, as contribuições

quadráticas $s_i s_j$, lineares s_i e constantes. Distribuindo produtos e fatores $\frac{1}{4}$ ou $\frac{1}{2}$, resulta em:

$$\begin{aligned} f(x(s)) = & \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{q_{ij}}{4} s_i s_j + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{q_{ij}}{4} s_i + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{q_{ij}}{4} s_j \\ & + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{q_{ij}}{4} + \sum_{i=1}^n \frac{c_i}{2} s_i + \sum_{i=1}^n \frac{c_i}{2}. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Agrupamos agora termos semelhantes. Primeiro, mantemos explicitamente o acoplamento $s_i s_j$:

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} \frac{q_{ij}}{4} s_i s_j. \quad (8.9)$$

Para os termos lineares em s_i , somamos todas as contribuições que contêm tal fator. Note que para um *índice fixo* i temos duas fontes:

- da segunda soma de (8.8), onde s_i aparece como *primeiro índice*, em que $i < j$.
- da terceira soma de (8.8), onde s_j aparece como *segundo índice*, em que $i < j$.

Nosso objetivo é reescrever o **segundo somatório**, destacando o índice da variável s_j . Observando a segunda soma é possível notar que para cada valor fixo de j , o índice i percorre todos os valores menores que j . Mais explicitamente, dado um valor fixo de j , o índice i assume valores de $1, 2, \dots, j-1$.

Portanto, podemos inverter a ordem das somas, colocando o índice j na soma externa e o índice i na soma interna. Fazendo isso explicitamente, temos:

$$\sum_{j=2}^n \sum_{i=1}^{j-1} \frac{1}{4} q_{ij} s_j.$$

Para deixar as expressões mais claras, fazemos a mudança opcional de índices para uniformizar as notações.

- Trocamos a letra j para i .
- Trocamos a letra i para h .

Dessa forma, o somatório fica escrito como:

$$\sum_{i=2}^n \sum_{h=1}^{i-1} \frac{1}{4} q_{hi} s_i,$$

onde agora está claro que o índice principal da variável é i e o índice auxiliar é h , com $h < i$. Isso deixa a expressão mais organizada e pronta para ser combinada com o primeiro somatório. Voltando ao primeiro somatório original:

$$\sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{4} q_{ij} s_i,$$

junto com a expressão que acabamos de obter após reindexar:

$$\sum_{i=2}^n \sum_{h=1}^{i-1} \frac{1}{4} q_{hi} s_i.$$

Observe agora claramente a estrutura dessas duas somas: a primeira soma pega índices $j > i$ e a segunda soma pega índices $h < i$. Ambas possuem a mesma variável s_i , o que nos permite facilmente combiná-las em um só somatório maior em s_i . Juntando essas duas parcelas, temos a expressão final:

$$\sum_{i=1}^n \left[\frac{1}{4} \left(\sum_{j=i+1}^n q_{ij} + \sum_{j=1}^{i-1} q_{ji} \right) \right] s_i.$$

Juntando esse resultado ao termo linear em s_i presente na eq. (8.8), obtemos finalmente a expressão completa para os termos em s_i :

$$\sum_{i=1}^n \left[\frac{1}{4} \left(\sum_{j=i+1}^n q_{ij} + \sum_{j=1}^{i-1} q_{ji} \right) + \frac{1}{2} c_i \right] s_i.$$

Restam agora apenas os termos independentes de s , os quais podemos reunir em uma constante global:

$$C_1 := \sum_{1 \leq i < j \leq n} \frac{q_{ij}}{4} + \sum_{i=1}^n \frac{c_i}{2}. \quad (8.10)$$

O funcional $f(x(s))$ se reescreve então como:

$$f(x(s)) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} \frac{q_{ij}}{4} s_i s_j + \sum_{i=1}^n \left[\frac{1}{4} \left(\sum_{j < i} q_{ji} + \sum_{j > i} q_{ij} \right) + \frac{c_i}{2} \right] s_i + C_1. \quad (8.11)$$

Para alinhar a forma (8.11) ao formalismo de *MaxCut*, adicionamos um *spin* auxiliar $s_0 \in$

$\{-1, +1\}$ e impomos $s_0 = +1$. Definimos pesos:

$$w_{ij} := \frac{q_{ij}}{4}, \quad 1 \leq i < j \leq n, \quad (8.12)$$

$$w_{0j} := \frac{1}{4} \left(\sum_{i < j} q_{ij} + \sum_{i > j} q_{ji} \right) + \frac{c_j}{2}, \quad 1 \leq j \leq n. \quad (8.13)$$

Reescrevendo (8.11) com estes pesos, obtemos a função

$$g(s) := \sum_{0 \leq i < j \leq n} w_{ij} s_i s_j + C_1. \quad (8.14)$$

Nosso problema agora é minimizar a função $g(s)$, que é equivalente a minimizar o QUBO original, pois C_1 é apenas um deslocamento constante e não altera o resultado final.

Considere o grafo completo $G = (V, E)$ com vértices $V = \{0, 1, \dots, n\}$ e pesos de arestas w_{ij} definidos em (8.12)–(8.13). Seja $W \subseteq V$ um subconjunto de vértices; definimos o corte:

$$\delta(W) := \{ij \in E \mid i \in W, j \notin W\}. \quad (8.15)$$

O peso do corte é

$$c(\delta(W)) := \sum_{ij \in \delta(W)} w_{ij}. \quad (8.16)$$

Escolhendo sempre $0 \in W$ (pois $s_0 \equiv +1$), cada atribuição de spins $\{s_i\}$ corresponde a uma partição $(W, V \setminus W)$ e vice-versa, através da relação

$$i \in W \iff s_i = +1, \quad i \in V \setminus W \iff s_i = -1. \quad (8.17)$$

Assim, a função de corte $c(\delta(W))$ pode ser expressa em termos de $s_i s_j$ por:

$$w_{ij}(1 - s_i s_j) = \begin{cases} 0 & \text{se } s_i = s_j \text{ (mesmo lado),} \\ 2w_{ij} & \text{se } s_i \neq s_j \text{ (lados opostos).} \end{cases} \Rightarrow \sum w_{ij}(1 - s_i s_j)/2 = c(\delta(W)).$$

Portanto:

$$\sum_{i < j} w_{ij} s_i s_j = \sum_{i < j} w_{ij} - 2c(\delta(W)).$$

Se substituirmos essa identidade em $g(s)$, obtemos:

$$g(s) = \sum_{i < j} w_{ij} s_i s_j + C_1 = \left(\sum_{i < j} w_{ij} - 2c(\delta(W)) \right) + C_1 = -2c(\delta(W)) + C_2,$$

onde $C_2 = C_1 + \sum_{i < j} w_{ij}$ é uma constante.

Consequentemente, minimizar $g(s)$ é equivalente a:

$$\min g(s) = \min(-2c(\delta(W)) + C_2) \iff \max c(\delta(W)).$$

Uma vez obtido o corte *maximal* $\delta(W^*)$ (com $0 \in W^*$), definimos

$$x_i^* := \begin{cases} 0, & i \in W^*, \\ 1, & i \in V \setminus W^*. \end{cases} \quad (8.18)$$

Este vetor binário x^* minimiza (8.4). Se preferirmos não fixar s_0 , a mesma equivalência continua válida, mas o grafo apresenta uma simetria global de troca de lados do corte, gerando duas soluções binárias associadas. Cabe mencionar que nas implementações e nos resultados presentes nesta dissertação optamos por fixar $s_0 = 1$.

Agora que mostramos como um problema QUBO pode ser transformado em um problema do tipo MaxCut, vamos ilustrar essa correspondência com um exemplo explícito e analítico. Para isso, consideraremos um caso trivial: o problema do Caixeiro Viajante com três cidades. Embora simples, esse exemplo é suficiente para evidenciar todas as etapas envolvidas na transformação de um problema QUBO em MaxCut. A versão QUBO do PCV impõe que todos os caminhos estejam presentes de forma a formar um ciclo hamiltoniano, isto é, o caixeiro deve visitar todas as cidades exatamente uma vez e retornar à cidade inicial. Através de uma construção analítica completa, mostraremos passo a passo como esse problema pode ser reescrito como uma instância de MaxCut, evidenciando de forma direta que a solução ótima do problema MaxCut resultante corresponde exatamente à solução ótima do problema QUBO original. Este exemplo servirá como guia prático para a aplicação geral da metodologia MBE a problemas de otimização combinatória.

8.2.1 Exemplo Analítico: Transformação de um Problema QUBO em MaxCut

Neste exemplo, vamos ilustrar de forma explícita como transformar um problema QUBO em uma instância equivalente de MaxCut. Para isso, consideramos o problema do caixeiro viajante com três cidades, um caso trivial mas suficiente para demonstrar todas as etapas do processo.

Codificação do Problema

Com três cidades, temos um grafo completo com três vértices e três arestas. Cada aresta (i, j) é representada por uma variável binária x_{ij} , que vale 1 se a aresta faz parte do ciclo e 0 caso contrário. As variáveis utilizadas são:

$$x_0 = x_{01}, \quad x_1 = x_{02}, \quad x_2 = x_{12}$$

Assim, o número de qubits necessários é 3.

Restrições do Problema

Para que a solução represente um ciclo hamiltoniano válido, são impostas as seguintes restrições:

- **Restrição de ciclo:** Todas as arestas devem estar presentes:

$$x_0 + x_1 + x_2 = 3$$

- **Restrição de conectividade:** Cada cidade deve estar conectada a duas outras:

$$x_0 + x_1 = 2, \quad x_0 + x_2 = 2, \quad x_1 + x_2 = 2$$

A formulação geométrica¹, se dá como na figura abaixo:

¹A exemplo, dos grafos K_4 e K_5 , o grafo em tela, pode ser descrito como sendo um n -esqueleto, em que $n = 2$, neste caso em particular, trata-se de um um simplexo 2-dimensional, (um triângulo), representado como Δ^2 , na representação de Schläfli-Coxeter, tem-se $\{3\}$.

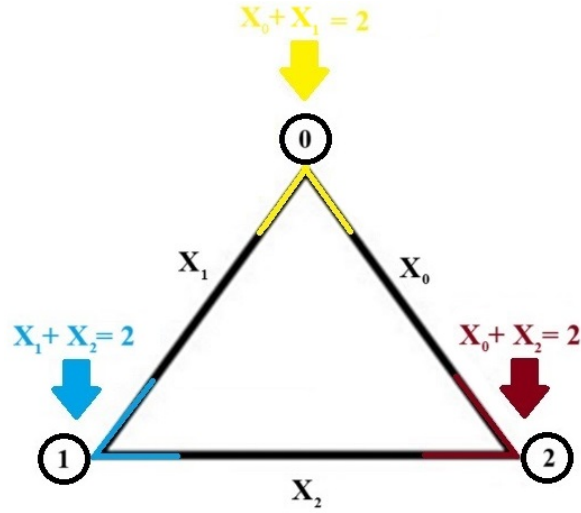


Figura 8.2: Circuito hamiltoniano em um grafo completo K_3 , com as restrições. Fonte: Autor.

Função de Custo QUBO

A função objetivo inclui um termo de custo linear associado às arestas e termos quadráticos que penalizam violações das restrições:

$$f(x) = x_0 + x_1 + x_2 + 10[(x_0 + x_1 - 2)^2 + (x_0 + x_2 - 2)^2 + (x_1 + x_2 - 2)^2] + 10(x_0 + x_1 + x_2 - 3)^2 \quad (8.19)$$

Expandindo os termos e agrupando, obtemos a forma padrão QUBO:

$$f(x) = 40(x_0x_1 + x_0x_2 + x_1x_2) - 109(x_0 + x_1 + x_2) + 210, \quad (8.20)$$

que pode ser escrita, à menos de uma constante (que é insignificante no problema de minimização) como:

$$f(x) = \sum_{i < j} q_{ij}x_ix_j + \sum_j c_jx_j, \quad (8.21)$$

onde no caso, $q_{ij} = 40$ para todo e qualquer i e j , e $c_j = -109$ para todo e qualquer j .

Transformação para MaxCut

Um problema QUBO com n variáveis pode ser convertido em um problema MaxCut em um grafo com $n+1$ vértices, com um vértice adicional s_0 introduzido, conforme demonstrado na figura (C.2), no apêndice C. A função MaxCut correspondente é dada por aquela definida na equação (8.22),

$$g(s) := \sum_{0 \leq i < j \leq n} w_{ij} s_i s_j + C_1, \quad (8.22)$$

com a seguinte correspondência dos coeficientes:

$$w_{ij} = \frac{1}{4} q_{ij}, \quad (8.23)$$

$$w_{0j} = \frac{1}{4} \left(\sum_{l < j} q_{lj} + \sum_{l > j} q_{jl} \right) + \frac{1}{2} c_j \quad (8.24)$$

e

$$C_i = \frac{1}{4} \sum_{i < j} q_{ij} + \frac{1}{2} \sum_i c_i. \quad (8.25)$$

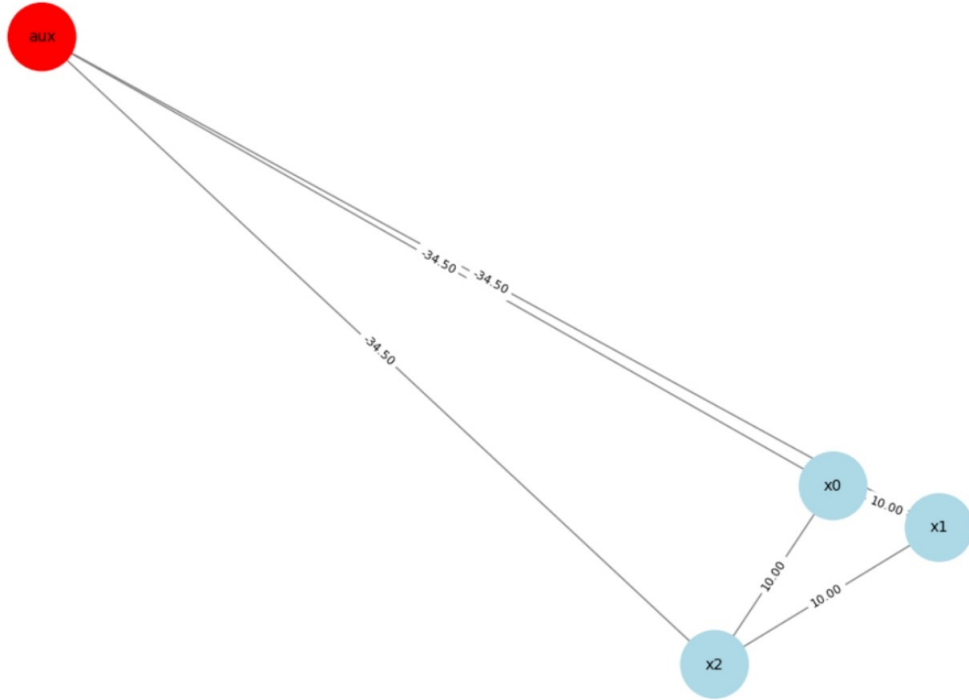


Figura 8.3: Descrição Geométrica de um grafo com descrição geométrica de um grafo com 4 nós $K_{(3+1)}$, sendo um nó virtual s_0 , com cada aresta com seu peso respectivo, aqui denotado por AUX , egresso do emulador Qiskit. Trata-se de um grafo planar. Fonte: Autor.

Visto que $q_{ij} = 40$ para todo e qualquer i e j , temos que

$$w_{ij} = \frac{40}{4} = 10. \quad (8.26)$$

Além disso, $c_j = -109$ para todo e qualquer j , de forma que

$$w_{0j} = \frac{1}{4}(40 + 40) + \frac{1}{2}(-109) = 20 - 54,5 = -34,5 \quad (8.27)$$

e

$$C_1 = \frac{1}{4}(40 + 40 + 40) + 3\left(\frac{1}{2}(-109)\right) = -133,5. \quad (8.28)$$

Portanto, a função *MaxCut* correspondente é:

$$g(s) = 10(s_1s_2 + s_1s_3 + s_2s_3) - 34,5(s_0s_1 + s_0s_2 + s_0s_3) - 133,5. \quad (8.29)$$

Agora que a função custo foi expressa no formalismo QUBO (Eq. 8.20) e reescrita como um problema equivalente de MaxCut, podemos comparar os resultados obtidos em ambos os casos, demonstrando analiticamente a equivalência entre as duas formulações para este exemplo particular.

Equivalência dos Resultados

A Tabela 8.2.1 mostra os valores obtidos para as oito possíveis configurações dos qubits (bitstrings), tanto para a função QUBO quanto para a função MaxCut. Os resultados confirmam a equivalência entre os dois formalismos: a solução ótima da função QUBO corresponde à solução ótima da função MaxCut.

#	x (bitstrings)	s (spin)	QUBO $f(x)$	MaxCut $g(s)$
1	111	+1 + 1 + 1	3	-207
2	011	-1 + 1 + 1	32	-178
3	101	+1 - 1 + 1	32	-178
4	110	+1 + 1 - 1	32	-178
5	001	-1 - 1 + 1	101	-109
6	010	-1 + 1 - 1	101	-109
7	100	+1 - 1 - 1	101	-109
8	000	-1 - 1 - 1	210	0

Tabela 8.1: Tabela apresentando os resultados para o formalismo QUBO e *MaxCut*.

Observação 8.2.1. *Nos Apêndices, mais particularmente no Apêndice C, pode-se encontrar um outro tipo de prova para este argumento, utilizando um ferramental mais algébrico, o que pode elucidar algumas passagens realizadas.*

8.3 O Algoritmo de Codificação em Múltiplas Bases

A busca por algoritmos quânticos que superem os melhores métodos clássicos em problemas de otimização é um dos pilares da computação quântica. Neste sentido, algoritmos variacionais quânticos surgiram como candidatos promissores. No entanto, sua utilidade prática é frequentemente limitada por desafios como a necessidade de circuitos de alta profundidade, a suscetibilidade a ruído e a presença de paisagens de custo não convexas, conhecidas como platôs estéreis.

Para enfrentar esses desafios, foi introduzida uma nova abordagem de otimização variacional, a Codificação em Múltiplas Bases. Esta técnica se afasta da codificação tradicional, que mapeia cada variável de um problema a um qubit distinto, geralmente na base computacional Z . Em vez disso, o MBE utiliza múltiplos eixos de um mesmo qubit para codificar diferentes variáveis, uma estratégia que não só otimiza o uso dos recursos quânticos, mas também melhora a performance do processo de otimização.

8.3.1 Mapeamento e Redução de Qubits

O conceito central do MBE é aumentar a capacidade de informação de cada qubit. Para um problema de otimização com n variáveis, em vez de alocar n qubits, o MBE tem o potencial de distribuir as variáveis entre as bases Pauli X , Y e Z . Tipicamente, $\lceil n/3 \rceil$ das variáveis são mapeadas para um dos valores esperados do qubit. Em nosso estudo, iremos fazer uso de somente dois eixos, X e Z . Neste caso, os valores esperados de σ^z codificam $n/2$ variáveis e as $n/2$ variáveis restantes são mapeadas no valor esperado de σ^x , do mesmo conjunto de qubits (a figura abaixo ilustra um caso de 4 bits).

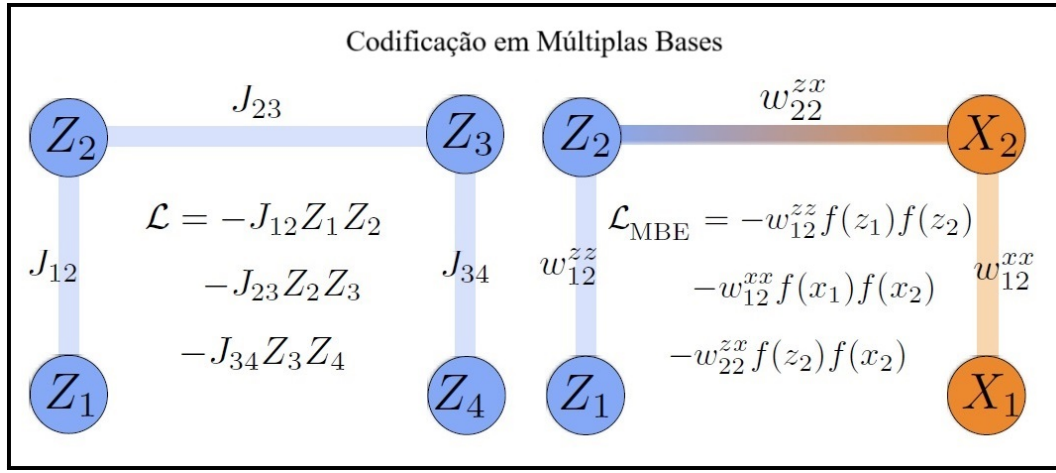


Figura 8.4: Ilustração do princípio do MBE. **(Esquerda)** Um problema de n vértices, tradicionalmente mapeado para n spins na base Z (azul), é remapeado em **(Direita)** um sistema de $n/2$ qubits, onde metade das variáveis é associada à base Z (azul) e a outra metade à base X (laranja) dos mesmos qubits. Figura adaptada de [180].

8.3.2 A Função de Custo MBE e a Não Linearidade

Diferente do VQE, que busca minimizar o valor esperado de um Hamiltoniano ($E = \langle \psi | H | \psi \rangle$), o MBE define uma nova função de custo ($\mathcal{L}_{MBE}$) que não corresponde a um Hamiltoniano físico. A função de custo do MBE é construída a partir do valor esperador dos operadores de um único qubit, em vez de operadores de múltiplos qubits.

Para garantir a otimização simultânea e equilibrada das variáveis nas diferentes bases, o MBE introduz uma função de ativação não linear, tipicamente a tangente hiperbólica ($\tanh$), aplicada a cada valor esperado. A função de custo para um problema *MaxCut* geral assume a forma:

$$\mathcal{L}_{MBE} = \sum_{i < j} w_{ij}^{zz} \tanh(\langle \sigma_i^z \rangle) \tanh(\langle \sigma_j^z \rangle) + \sum_{i < j} w_{ij}^{xx} \tanh(\langle \sigma_i^x \rangle) \tanh(\langle \sigma_j^x \rangle) + \sum_{i,j} w_{ij}^{zx} \tanh(\langle \sigma_i^z \rangle) \tanh(\langle \sigma_j^x \rangle) \quad (8.30)$$

onde os termos w_{ij}^{zz} , w_{ij}^{xx} e w_{ij}^{zx} representam os pesos das arestas entre vértices codificados na mesma base (Z-Z, X-X) ou em bases cruzadas (Z-X).

Exemplo Prático: Consideremos um grafo de 4 vértices com pesos de aresta ω_{12} , ω_{34} e ω_{13} . No formalismo VQE tradicional, o problema seria mapeado para um Hamiltoniano de 4 qubits:

$$H = \omega_{12} \sigma_1^z \sigma_2^z + \omega_{34} \sigma_3^z \sigma_4^z + \omega_{13} \sigma_1^z \sigma_3^z \quad (8.31)$$

Com o MBE, podemos codificar este mesmo problema em apenas 2 qubits. Mapeamos os vértices 1 e 2 para a base Z dos qubits 1 e 2, e os vértices 3 e 4 para a base X dos mesmos qubits. A função de custo a ser minimizada seria:

$$\mathcal{L}_{MBE} = w_{12}^{zz} \tanh(\langle \sigma_1^z \rangle) \tanh(\langle \sigma_2^z \rangle) + w_{34}^{xx} \tanh(\langle \sigma_1^x \rangle) \tanh(\langle \sigma_2^x \rangle) + w_{13}^{zx} \tanh(\langle \sigma_1^z \rangle) \tanh(\langle \sigma_1^x \rangle) \quad (8.32)$$

A minimização de $\mathcal{L}_{MBE}$ é realizada através de métodos clássicos, como a descida de gradiente, que atualiza os parâmetros do circuito quântico variacional.

A introdução da não linearidade via $\tanh(x)$ é crucial devido a uma restrição fundamental de cada qubit, ditada pela normalização na esfera de Bloch. Para qualquer estado puro de um qubit, a soma dos quadrados das expectativas dos operadores de Pauli é limitada:

$$(\langle \sigma_i^z \rangle)^2 + (\langle \sigma_i^x \rangle)^2 + (\langle \sigma_i^y \rangle)^2 = 1, \quad (8.33)$$

sendo menor que 1 para estados mistos. No nosso exemplo, visto que estamos nos limitando aos valores esperados de X e Z , a condição se ajusta para $(\langle \sigma_i^z \rangle)^2 + (\langle \sigma_i^x \rangle)^2 \leq 1$. Esta condição impõe um *trade-off*: um estado não pode ter simultaneamente valores máximos de expectativa nas bases X e Z . A função $\tanh(x)$, cujo gradiente se aproxima de zero perto dos polos ± 1 , desincentiva a otimização de uma base em detrimento total da outra, ajudando o algoritmo a escapar de mínimos locais e promovendo uma otimização mais global e robusta.

Por fim, como a otimização de $\mathcal{L}_{MBE}$ resulta em valores contínuos para $\langle \sigma_i^k \rangle$ (non nosso exemplo, com $k = x, z$), é necessário um passo final para traduzir o estado quântico resultante em uma solução clássica para o problema de corte (um conjunto de valores ± 1). Isso é feito através de um procedimento de arredondamento, aplicado após a otimização. A fórmula para calcular o corte final, ou a pontuação da solução, é:

$$\mathcal{C}_{MBE}(\hat{\theta}, G) = \sum_{j < i}^{n/2} w_{ij}^{zz} [1 - R(\langle \sigma_i^z \rangle) R(\langle \sigma_j^z \rangle)] + \sum_{j < i}^{n/2} w_{ij}^{xx} [1 - R(\langle \sigma_i^x \rangle) R(\langle \sigma_j^x \rangle)] + \sum_{j, i}^{n/2} w_{ij}^{zx} [1 - R(\langle \sigma_i^z \rangle) R(\langle \sigma_j^x \rangle)] \quad (8.34)$$

onde $R(\cdot)$ é a função de arredondamento que mapeia o valor esperado para o inteiro mais próximo (± 1), dependendo de como os vértices i e j foram codificados. Esta é a estimativa computacional final do MaxCut.

8.3.3 Vantagens e Implicações

A abordagem MBE demonstrou empiricamente uma série de vantagens sobre as técnicas de VQE tradicionais, utilizando os mesmos circuitos quânticos:

- **Performance Superior:** Em experimentos de *MaxCut*, o MBE superou o VQE em 5 a 7% na qualidade da solução encontrada (razão de corte média). A estrutura da sua função de custo, que exige biestabilidade nos eixos Z e X para convergir, torna-o mais robusto contra mínimos locais que afetam o VQE.
- **Redução de Recursos Quânticos:** Como já mencionado, o MBE requer um número menor de qubits, um avanço prático para o hardware quântico da era NISQ.
- **Eficácia com Circuitos Rasos:** O MBE alcança alta performance com circuitos de profundidade relativamente baixa. A expressividade adicional fornecida pela função de custo não linear reduz a necessidade de gerar emaranhamento complexo com circuitos profundos. Isso torna o algoritmo mais resistente a ruído e permite uma estratégia eficiente de *multishot*: executar o circuito raso várias vezes com diferentes inicializações para encontrar a solução ótima com alta probabilidade, um método mais rápido e coerente do que tentar convergir com um único circuito profundo e complexo.

Com a base teórica do MBE estabelecida, o próximo passo é aplicá-lo ao PCV. Como veremos, a capacidade de converter qualquer problema QUBO em uma instância de MaxCut, como demonstrado na seção anterior, nos permitirá que esta técnica de otimização seja utilizada de forma bastante eficiente.

8.4 Conclusões e Síntese do Capítulo 8

Trata-se o formalismo MBE em uma técnica para otimizar a utilização de qubits, que nos dá permissividade para representar variáveis em diferentes eixos destes, como Z , X , podendo se estender à Y , desta forma, reduzindo significativamente a sua quantidade necessária e simplificando a implementação dos circuitos. No presente capítulo, fornecemos a conversão do QUBO em MaxCut, que é uma formalismo mais adequado para lidar com MBE, uma vez que, contrariamente ao formalismo QUBO, que possui penalidades, este não as têm. Também foi apresentada a função custo para este formalismo, cuja motivação e inspiração são egressas das Redes Neurais, utilizando-se de uma função não linear, que serve como função de ativação.

É com este formalismo que vamos resolver o PCV e que como este é um problema de otimização combinatória, apresenta um grande número de variáveis, portanto, é um problema ideal para a resolução com esta técnica.

Pode-se dizer que trata-se do estado da arte, uma vez que sua utilização para a resolução desta classe de problemas encontra-se ainda incipiente e em fase experimental.

Capítulo 9

Resultados e Discussões

Nesta seção, apresentamos os resultados de uma análise comparativa entre diferentes abordagens variacionais aplicadas à resolução do problema do caixeiro viajante. O objetivo central é avaliar o desempenho do MBE em relação a outras estratégias tradicionais baseadas em algoritmos quânticos variacionais. Para isso, selecionamos duas instâncias ilustrativas do PCV com quatro e cinco cidades, respectivamente. Apesar de pequenas, essas instâncias são suficientemente ricas para permitir uma análise tanto analítica quanto computacional completa, além de capturarem a estrutura essencial de um problema de otimização combinatória. Como veremos, essas instâncias também simplificam a forma do Hamiltoniano correspondente, o que possibilita trabalhar com um número reduzido de qubits.

Iniciamos este capítulo definindo a função custo a ser utilizada nas diferentes abordagens.

9.1 Função custo para 4 e 5 cidades

O problema do caixeiro viajante com quatro cidades pode ser representado pelo grafo completo K_4 , conforme ilustrado na Figura 9.1. As cidades são representadas pelos nós numerados de 0 a 3, enquanto as possíveis conexões entre elas são indicadas pelas arestas rotuladas como $x_0, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5$. Cada variável x_i é binária, assumindo o valor 1 se a respectiva aresta fizer parte do ciclo hamiltoniano ótimo, e 0 caso contrário.

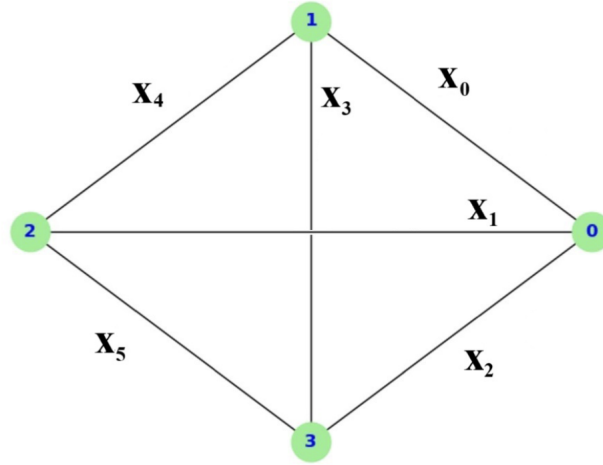


Figura 9.1: Grafo ilustrando o problema de 4 cidades. Fonte: Autor.

O objetivo é encontrar um ciclo fechado que passe por todas as cidades exatamente uma vez, minimizando o custo total do percurso. Esse custo pode ser descrito por um Hamiltoniano na forma de Ising, em que as variáveis x_i representam estados de qubits e as restrições asseguram que a solução forme um ciclo hamiltoniano válido.

Duas restrições fundamentais são impostas à formulação:

1. **Cada cidade deve ter exatamente duas conexões:** Isso assegura que nenhuma cidade seja visitada mais de uma vez e que o caminho seja fechado.
2. **O número total de arestas selecionadas deve ser igual a 4:** Isso evita a formação de subciclos desconectados.

A Figura 9.2 ilustra essas restrições para o caso de quatro cidades. Note que, enquanto na Figura 9.1 as variáveis são denotadas por x_i , na Figura 9.2 utilizam-se variáveis q_i , com $q_i = x_i$, pois fazem referência implícita ao estado do qubit correspondente.

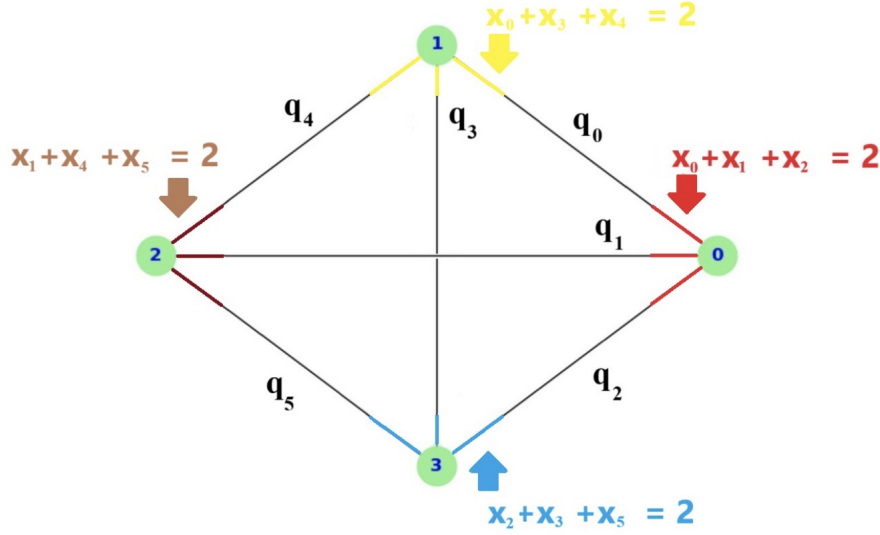


Figura 9.2: Circuito hamiltoniano em um grafo completo K_4 , com as restrições, note-se que na figura (9.1), descrita acima, utilizou-se de variáveis denotadas por X_n , sendo neste caso em particular $n \in \{0, \dots, 5\}$, neste exemplo, utilizou-se das variáveis do tipo q_n , também neste caso, $n \in \{0, \dots, 5\}$, tendo-se portanto, $q_n = X_n$, pois fazem referência implícita a qubit. Fonte: Autor.

As equações coloridas ao lado de cada cidade explicitam a primeira restrição, exigindo que cada nó tenha exatamente duas conexões. Por exemplo, para a cidade 0, a equação $x_0 + x_1 + x_2 = 2$ indica que duas das três arestas conectadas ao nó 0 devem ser escolhidas. O mesmo se aplica aos demais nós.

A segunda restrição impõe que a soma total das variáveis seja igual a 4, assegurando que exatamente quatro arestas compõem o ciclo:

$$x_0 + x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 = 4. \quad (9.1)$$

Definindo os custos das arestas por h_i , a função custo associada ao problema pode ser expressa como:

$$\begin{aligned} C(\vec{x}) = & \sum_{i=0}^5 h_i x_i + \lambda_1 \left((x_0 + x_1 + x_2 - 2)^2 + (x_0 + x_3 + x_4 - 2)^2 \right. \\ & \left. + (x_1 + x_3 + x_5 - 2)^2 + (x_2 + x_4 + x_5 - 2)^2 \right) \\ & + \lambda_2 \left((x_0 + x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 - 4)^2 \right). \end{aligned} \quad (9.2)$$

Esta função custo pode ser interpretada da seguinte forma:

- O primeiro termo, $\sum_{i=0}^5 h_i x_i$, representa o custo total do percurso, onde h_i é o custo associado à aresta i .

- O segundo termo, ponderado por λ_1 , garante que cada cidade tenha exatamente duas conexões.
- O terceiro termo, ponderado por λ_2 , assegura que o ciclo fechado contenha exatamente quatro arestas.

Os parâmetros λ_1 e λ_2 são coeficientes de penalização que controlam o peso das restrições na função objetivo. Valores suficientemente grandes para esses parâmetros penalizam fortemente soluções inviáveis, direcionando a minimização para soluções que respeitam as restrições.

Para o caso de 5 cidades, o procedimento adotado é completamente análogo ao apresentado acima. A construção da função custo segue a mesma lógica, com o acréscimo de novas variáveis binárias representando as arestas adicionais de um grafo completo K_5 , bem como a ampliação das restrições para contemplar o novo vértice. O circuito Hamiltoniano ilustrado na Figura 9.3 sintetiza de forma clara essa extensão, mostrando como cada vértice está associado a uma equação que impõe exatamente duas conexões por cidade, respeitando a estrutura de um ciclo hamiltoniano. Essa visualização facilita a compreensão da generalização do modelo para instâncias maiores do problema.

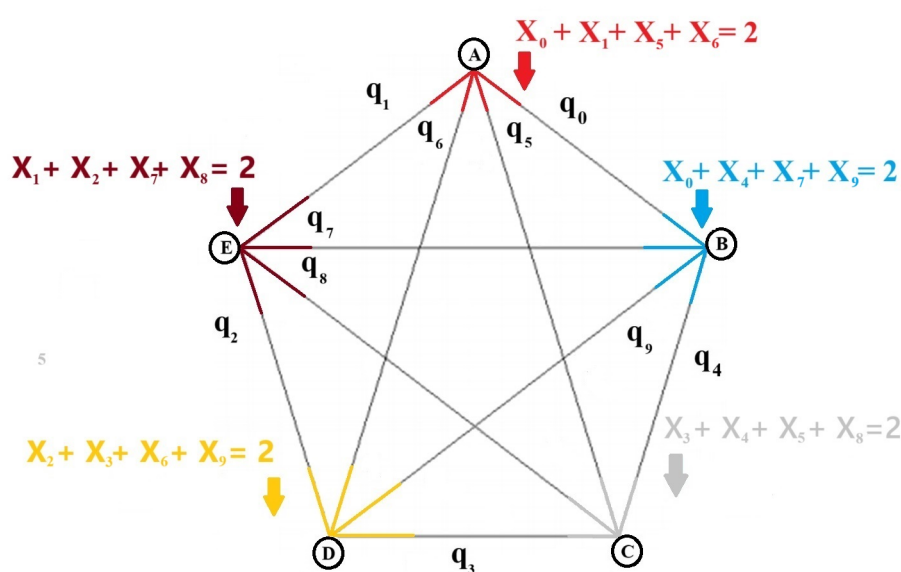


Figura 9.3: Circuito hamiltoniano em um grafo completo K_5 , com as restrições associadas a cada vértice. Fonte: Autor.

Agora que apresentamos as funções custo para as instâncias com quatro e cinco cidades, passamos à análise dos resultados obtidos a partir da aplicação dos formalismos de codificação em múltiplas bases discutidos nas seções anteriores.

9.2 Resultados do Formalismo MBE

Na presente dissertação propôs-se a realizar uma pesquisa comparada e sistemática entre três métodos distintos para a resolução do PCV por meio de técnicas de otimização quântica variacional:

1. o formalismo *VQE* aplicado diretamente à formulação padrão do TSP (a que se pode denominar doravante, *VQE-TSP*);
2. o *VQE* aplicado à formulação *MaxCut* obtida pela conversão a partir do TSP (denominada doravante *VQE-TSP-Maxcut*);
3. o formalismo *Multibasis Encoding* (*MBE*), aplicado ao mesmo problema *MaxCut* obtido da conversão do TSP.

Em nossos experimentos, vamos utilizar as três observáveis, X , Y e Z , para a codificação das variáveis binárias, procurando analisar o desempenho do formalismo MBE com todo seu potencial de compressão. Visando assegurar um estudo comparado judicioso e em que estivesse sobre condições de isonomia rigorosamente equivalentes entre as técnicas, buscou-se em todas as simulações fossem realizadas sob as mesmas condições experimentais:

- Número fixo de disparos (cuja denominação usual é o anglicismo *shots*): 10.000;
- Estrutura dos circuitos quânticos: uma camada do *Ansatz TwoLocal linear* disponível na biblioteca Qiskit;
- Dez inicializações diferentes para cada método (cuja denominação usual é o anglicismo *seeds*), garantindo comparabilidade estatística dos resultados.

As arquiteturas dos circuitos utilizados são apresentadas nas Figuras (9.4 e (9.5).

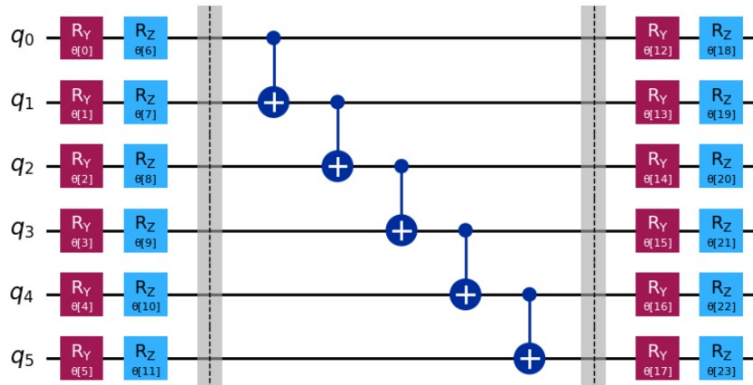


Figura 9.4: Circuito *TwoLocal* utilizado nos experimentos com *VQE-TSP* e *VQE-TSP-Maxcut* para o caso de 4 nós. Fonte: autor.

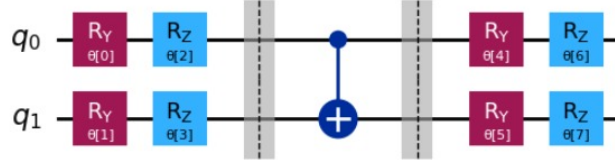


Figura 9.5: Circuito utilizado para o MBE (equivalente ao PCE com $k = 1$) nos experimentos com 4 nós. Fonte: autor.

É importante ressaltar que, embora as estruturas dos circuitos sejam idênticas, a quantidade de qubits varia de acordo com o método aplicado. Todos os experimentos foram realizados por simulações utilizando a biblioteca Qiskit-Aer com o método *statevector*. Os experimentos foram realizados em um equipamento com a seguinte configuração:

- processador Intel(R) Core(TM);
- i7-14700K de 3,40 GHz e 32 GB de RAM.

Os códigos utilizados nas simulações e os dados brutos estarão disponíveis futuramente em um repositório público no *Github*, permitindo a reprodução e validação dos resultados apresentados *in loco*.

9.2.1 Métrica de Avaliação

Como lecionam Monit Sharma e Hoong Chuin Lau, [181], a avaliação dos métodos foi baseada na métrica do *Gap* percentual de optimalidade, assim definida:

$$Gap(\%) = \frac{(Obj.Obtained - Obj.Best) \times 100}{Obj.Best} \quad (9.3)$$

Na equação (9.3), $Obj.Best$ trata-se do valor ótimo conhecido para cada instância e $Obj.Obtained$ é a energia obtida pelos métodos testados. Como o *VQE* tem por característica fornecer uma distribuição de amostras, utilizou-se a medida de tendência central, cuja amostra mais frequente figura como solução representativa (moda), enquanto o MBE retorna diretamente uma única solução candidata. Abordagem análoga foi utilizada em [181].

9.2.2 Discussão e Comparação dos Resultados

Os resultados detalhados nas Tabelas (9.1) e (9.2) evidenciam diferenças relevantes entre os métodos analisados, especialmente em relação ao desempenho computacional e à qualidade das soluções obtidas.

Seed	VQE-TSP			VQE-TSP-Maxcut			MBE-TSP-Maxcut		
	Feas	Gap (%)	Energia	Feas	Gap (%)	Energia	Feas	Gap (%)	Energia
0	Sim	0.0	4.0	Sim	0.0	4.0	Não	50.0	6.0
1	Não	7575.0	307.0	Não	5025.0	205.0	Não	50.0	6.0
2	Não	5025.0	205.0	Não	5025.0	205.0	Não	50.0	6.0
3	Sim	0.0	4.0	Sim	0.0	4.0	Não	5025.0	205.0
4	Não	50.0	6.0	Não	50.0	6.0	Não	50.0	6.0
5	Não	50.0	6.0	Não	7475.0	303.0	Não	50.0	6.0
6	Não	7475.0	303.0	Não	7475.0	303.0	Não	50.0	6.0
7	Não	12500.0	504.0	Não	5025.0	205.0	Não	5025.0	205.0
8	Não	5050.0	266.0	Não	5050.0	266.0	Não	50.0	6.0
9	Não	50.0	6.0	Não	7500.0	304.0	Não	50.0	6.0

Tabela 9.1: Resultados por *seed* para os métodos VQE-TSP, VQE-TSP-Maxcut e MBE-TSP-Maxcut com 4 nós. **Feas** = ‘Sim’ se a energia corresponde a uma rota válida (*feasible*). Fonte: autor.

Seed	VQE-TSP			VQE-TSP-Maxcut			MBE-TSP-Maxcut		
	Feas	Gap (%)	Energia	Feas	Gap (%)	Energia	Feas	Gap (%)	Energia
0	Não	6060.0	308.0	Não	6060.0	308.0	Não	6000.0	305.0
1	Não	8060.0	408.0	Não	8060.0	408.0	Não	6000.0	305.0
2	Não	6080.0	309.0	Não	6080.0	309.0	Sim	60.0	8.0
3	Não	14020.0	706.0	Não	14020.0	706.0	Não	6020.0	306.0
4	Não	4060.0	208.0	Não	4060.0	208.0	Não	6020.0	306.0
5	Não	10040.0	507.0	Não	10040.0	507.0	Não	6000.0	305.0
6	Não	12040.0	607.0	Não	14020.0	706.0	Não	6020.0	306.0
7	Não	14080.0	709.0	Não	14080.0	709.0	Não	4020.0	206.0
8	Não	4020.0	206.0	Não	4020.0	206.0	Sim	0.0	5.0
9	Não	12040.0	607.0	Não	12040.0	607.0	Não	4020.0	206.0

Tabela 9.2: Resultados por *seed* para os métodos VQE-TSP, VQE-TSP-Maxcut e PCE-TSP-Maxcut com 5 nós. **Feas** = ‘Sim’ se a energia corresponde a uma rota válida (*feasible*). Fonte: autor.

Observação 9.2.1. *O anglicismo feasible, diz respeito a valores válidos, não necessariamente ótimos, trata-se do caso em que a energia figura com valor 8, como pode-se ver na tabela (9.2).*

Para instâncias com 5 nós, o método MBE se destacou significativamente ao fornecer soluções viáveis com valores de energia notavelmente menores em comparação aos métodos tradicionais VQE-TSP e VQE-TSP-MaxCut. Além disso, o MBE utilizou menos da metade dos qubits e menos da metade dos parâmetros ajustáveis em comparação ao VQE tradicional (apenas 4 qubits contra 10 e 16 parâmetros contra 40, respectivamente).

Um aspecto particularmente relevante evidenciado pela pesquisa é a drástica diferença no tempo computacional entre os métodos, os baseados no VQE necessitaram de aproximadamente 60 minutos para cada instância de 5 nós, enquanto que o MBE realizou as mesmas simulações em apenas 5 minutos, uma redução substancial que indica forte potencial para implementação em dispositivos quânticos reais em curto prazo.

Método	Nº Nós	Nº Qubits	Nº Parâmetros	Melhor Resultado	Tempo (min)
VQE-TSP	4	6	24	4	50
VQE-TSP-Maxcut	4	6	24	4	50
PCE-TSP-Maxcut	4	2	8	6	3
VQE-TSP	5	10	40	308.0	60
VQE-TSP-Maxcut	5	10	40	206.0	60
PCE-TSP-Maxcut	5	4	16	5.0	5

Tabela 9.3: Comparação dos resultados obtidos com os três métodos variacionais aplicados ao PCV para instâncias com 4 e 5 cidades. São apresentados o número de nós, número de qubits utilizados, número total de parâmetros livres do *Ansatz*, o melhor valor da função custo obtido e o tempo de execução necessário para cada abordagem.

Para instâncias menores, como o caso com 4 nós, o MBE apresentou limitações ao não identificar consistentemente a solução ótima. Ainda assim, manteve a vantagem de exigir muito menos recursos, apresentando tempos de execução consideravelmente inferiores (3 minutos contra 50 minutos para o VQE), além de gerar proporcionalmente mais soluções viáveis, embora não ótimas. Este comportamento sugere que o método MBE é especialmente vantajoso para problemas maiores e mais complexos, o que pode exigir uma investigação mais detalhada do comportamento do algoritmo caso se aumente as camadas (e por consequência, a quantidade de parâmetros) ou menos se diminua a compressão, talvez utilizando $[X, Z]$ apenas. Pode-se conjecturar que com essas mudanças o algoritmo tenha maior expressividade e consiga encontrar o valor ótimo.

Uma extensão natural desta pesquisa consiste em ampliar esta análise para outros grafos além dos que aqui foram estudados, especialmente se considerarmos o formalismo mais geral do PCV, definido por Lucas, [20], que possibilita codificar problemas de mais de 5 cidades sem gerar 2 subciclos. Além disso, uma análise do desempenho do MBE em simulações ruidosas também certamente trariam uma contribuição de valor para entender o comportamento dessa abordagem em situações mais realistas, considerando os computadores quânticos da IBM.

9.3 Conclusões e Síntese do Capítulo 9

No presente Capítulo foram apresentados inicialmente, os primeiros experimentos, utilizando o formalismo QUBO, a conversão para o de Ising e o uso do algoritmo VQE para a solução do PCV em quatro e cinco cidades.

- 4 Cidades (VQE)

Representa-se a solução óptima pelo estado 101011, cuja energia mínima é 4, sendo este o menor caminho. O objetivo do experimento foi modificar os valores das arestas centrais e verificar como isso afeta a probabilidade do algoritmo encontrar a solução correta. Quando os pesos das arestas centrais aumentam, a predominância do estado verdadeiro tende a aumentar, de forma que o algoritmo passa a escolher com mais frequência a resposta correta.

- 5 Cidades (VQE)

Da mesma forma, representa-se o estado 1111100000, cuja energia mínima é 5, sendo este o menor caminho.

Tanto no VQE quanto no MBE, os parâmetros iniciais do Ansatz são importantes para definir a trajetória da otimização clássica. Se a inicialização não for bem escolhida, o algoritmo pode começar sua busca em uma região do espaço de soluções que não levam à resposta correta, resultando em uma convergência inadequada. Por conta disto, utilizou-se no presente trabalho 10 inicializações aleatórias para todos os algoritmos, com 1000. Quanto aos resultados utilizando-se MaxCut-MBE, obteve-se respectivamente para 4 e 5 cidades os resultados seguintes (vide tabelas (9.1 e 9.2), verifica-se que no caso de 4 nós, obteve-se um valor viável, mas, não ótimo, já no caso com 5 nós obteve-se um valor ótimo. A discussão do porque destes resultados ainda encontra incipiente e demanda mais experimentos e investigação. Não obstante, provamos a viabilidade do algoritmo MBE.

Capítulo 10

Conclusões Gerais

Nesta dissertação, exploramos a aplicação de algoritmos quânticos variacionais ao Problema do Caixeiro Viajante, um problema clássico de otimização combinatória e membro da classe *NP*-difícil. Partindo de formulações como o modelo de Ising, o formalismo QUBO e sua relação com o problema *MaxCut*, discutimos como esses frameworks podem ser utilizados para transpor o PCV para um contexto de computação quântica.

Implementamos a resolução de instâncias com 4 e 5 cidades utilizando o algoritmo VQE no ambiente Qiskit. As simulações evidenciaram que, mesmo com circuitos de baixa profundidade e ruído nulo, é possível obter soluções ótimas ou próximas do valor ótimo com alta frequência. Isso valida o uso de algoritmos variacionais como abordagem promissora para esse tipo de problema.

Introduzimos ainda a técnica de codificação em múltiplas bases, que se mostrou vantajosa ao reduzir o número de qubits necessários sem comprometer o desempenho. Essa economia de recursos torna a MBE uma candidata natural para aplicações em dispositivos NISQ, onde a limitação de qubits é um fator crítico. A literatura já indicava ganhos teóricos com MBE, e os resultados aqui apresentados reforçam esse potencial.

Egresso da teoria da complexidade computacional, o Problema do Caixeiro Viajante PCV, busca responder qual é o caminho mais eficiente entre um certo número de cidades levando em conta a priori fatores como as distâncias e tendo-se um ponto de saída e um de chegada dentre todos os possíveis. Trata-se de um problema da classe NP-complexa em otimização combinatória, importante em ciência da computação teórica e pesquisa operacional, na presente dissertação se trouxe a lume o problema sob o ponto de vista da computação quântica e seus algoritmos. Em uma sequência, discorreu-se sobre vários formalismos, cada um dando sua contribuição em um arcabouço computacional. Esta fusão de algoritmos e métodos, culminou nos primeiros resultados

experimentais que se realizou e que mostraram que em princípio, é promissor o uso da computação quântica na resolução destes problemas, não obstante, utilizando-se primeiramente algoritmos que são da classe dos VQAs, no caso em tela, o VQE, estruturando-se a programação em um suíte software que é um emulador de programação quântica, o QISKIT, pode-se estruturar e construir os primeiros e rudimentares resultados, a partir da edificação de um circuito, que denomina-se *Ansatz*, um germanismo que diz respeito a um circuito em que se experimenta, se faz uma tentativa para a resolução de um problema.

Entremeiando este sequenciamento, introduziu-se um formalismo denominado QUBO, fundamental no entendimento e resolução de problemas da classe supradescrita, trata-se de um problema de otimização combinatória com uma ampla gama de aplicações, dentre as quais aprendizado de máquina. Um problema QUBO a exemplo do PCV, é um problema NP-complexo e para muitos problemas clássicos da ciência da computação teórica, como MaxCut, coloração de grafos e o problema de partição, puderam ter sua expressão mais explícita mergulhados o formalismo QUBO.

Devido à sua estreita conexão com modelos de Ising, o formalismo QUBO constitui uma classe de problema central para computação quântica adiabática, onde é resolvido por meio de um processo físico chamado recozimento quântico. O formalismo de Ising, também denominado de modelo de Lenz-Ising, assim denominado homenagem aos físicos Ernst Ising e Wilhelm Lenz¹, é um formalismo matemático de ferromagnetismo egresso da mecânica estatística, consiste em variáveis discretas que representam momentos de dipolo magnético de *spins* atômicos que podem estar em um de dois estados (+1 ou -1). Os *spins* são organizados em um gráfico, geralmente uma estrutura de rede, em que há uma repetição periódica desta geometria em todas as direções, permitindo que cada spin interaja com seus vizinhos. Spins vizinhos que concordam têm energia menor do que aqueles que discordam, o sistema tende à energia mais baixa, mas, o calor perturba essa tendência, criando assim a possibilidade de diferentes fases estruturais.

Em seu formato bidimensional de rede quadrada é um dos modelos estatísticos mais simples para mostrar uma transição de fase. Embora seja um modelo altamente simplificado de um material magnético, o modelo de Ising ainda pode fornecer resultados qualitativos e, às vezes, quantitativos aplicáveis a sistemas físicos reais. Não apresenta transição de fase, sendo que o formalismo bidimensional de rede quadrada é muito mais complexo e só recebeu uma descrição analítica muito tempo depois. Geralmente é resolvido por um método de matriz de transferência, embora exista uma abordagem que relaciona o modelo a uma teoria quântica de campos fermiônicos não

¹O modelo de Ising foi inventado pelo físico Wilhelm Lenz, no ano de 1920, que o apresentou como um problema ao seu aluno Ernst Ising, o modelo unidimensional foi resolvido por Ising em sua tese de doutorado de 1924.

interagentes.

Em dimensões maiores que quatro, a transição de fase do modelo de Ising é descrita pela teoria de campo médio. O modelo de Ising para dimensões maiores também foi explorado em relação a várias topologias de árvores no final da década de 1970, culminando em uma solução exata do modelo de Barth, de campo zero e independente do tempo, para árvores de Cayley fechadas com razão de ramificação arbitrária e portanto, dimensionalidade arbitrariamente grande dentro dos ramos da árvore.

Em suma, o formalismo de Ising sem um campo externo pode ser formulado de forma equivalente como um problema QUBO ou mesmo em MaxCut² em grafos, que podendo ser resolvido por meio de otimização combinatória. Um outro formalismo que fora utilizado na dissertação foi o MaxCut, que consiste em princípio de se considerar um grafo, sendo o corte máximo, um cujo tamanho é pelo menos o tamanho de qualquer outro, dito de maneira outra mais formal, trata-se de uma partição dos vértices do grafo em dois conjuntos complementares, por exemplo, K , L , tal que o número de arestas entre K e L seja o maior possível, o problema para se encontrar tal corte é denominado como MaxCut.

Pode-se enunciar este algoritmo da forma seguinte, deseja-se um subconjunto K do conjunto de vértices tal que o número de arestas entre L e o subconjunto complementar seja o maior possível, de forma equivalente, deseja-se um subgrafo bipartido do grafo com o maior número de arestas possível. Na presente dissertação apresentou-se um exemplo, utilizando um algoritmo denominado Força Bruta, em que figura um problema de três nós (ou cidades), os objetivos deste experimento discorreremos adiante. Existe uma versão mais geral do problema, denominada MaxCut ponderado, em que cada aresta é associada a um peso, e o objetivo é maximizar o peso total das arestas entre K e seu complemento, em vez do número de arestas. O problema do corte máximo ponderado, que permite pesos positivos e negativos, pode ser trivialmente transformado em um problema de corte mínimo ponderado invertendo o sinal em todos os pesos.

Em computação quântica, existem os algoritmos variacionais, denominados VQAs, que já descreveu-se acima *en passant*, em particular o que foi utilizado na presente dissertação é o VQE, que é um algoritmo quântico utilizado em química quântica, simulações quânticas e problemas de otimização, que é o escopo desta dissertação. Trata-se de um algoritmo híbrido, portanto, utiliza-se da computação clássica e quântica para encontrar o estado fundamental de um determinado

²O formalismo QUBO e de Ising são isomorfos, assim como pode-se relacionar o QUBO com o MaxCut, a partir de um isomorfismo, portanto, estes formalismos se relacionam de maneira muito intrínseca. Na presente dissertação realizou-se um experimento com 3 nós (ou cidades), utilizando para se ilustrar acima de qualquer dúvida razoável a equivalência entre o formalismo QUBO e o MaxCut, o que se mostrou verdadeiro.

sistema físico. Partindo-se de um *Ansatz*, o processador quântico calcula o valor esperado do sistema em relação a um observável, geralmente o hamiltoniano e um otimizador clássico é usado para melhorar a hipótese, introduzida pelo *Ansatz*, naturalmente, este algoritmo foi estruturado sob a égide do método variacional da mecânica quântica.

Foi originalmente proposto em 2014, têm aplicações em áreas outras como aprendizado de máquina quântico sendo fundamental em algoritmos híbridos gerais entre computadores quânticos e clássicos, trata-se de um exemplo de um algoritmo quântico de escala intermediária com ruído, muito embora este tema relacionado a ruídos, não foi tratado de maneira contumaz, é um assunto que pode encontrar aplicações em trabalhos futuros.

O algoritmo em tela possui como objetivo encontrar um conjunto de operações quânticas que prepare o estado de menor energia de uma aproximação, que esteja nas cercanias de alguma grandeza-alvo ou observável. Não obstante, o único requisito estrito para a representação de um observável seja sua eficiência na estimativa de seus valores esperados, em inúmeras vezes é mais simples se o operador tiver uma expressão compacta em termos de operadores de Pauli ou produtos tensoriais destes, considerando-se um sistema fermiônico, geralmente é mais conveniente qubitizar, que tem por sentido denotativo escrever o hamiltoniano de muitos corpos do sistema usando a segunda quantização e em seguida, usar um mapeamento para escrever os operadores de criação-aniquilação em termos de operadores de Pauli. Esquemas comuns para férmions incluem a transformação de Jordan-Wigner, a transformação de Bravyi-Kitaev e a transformação de paridade. Sendo o hamiltoniano $\hat{H}$ escrito em termos de operadores de Pauli e levando-se em conta que estados irrelevantes os espaços de dimensão finita são descartados, consistiria em uma combinação linear de strings de Pauli $\hat{P}_i$, produtos tensoriais de operadores de Pauli, um exemplo seria $\{X \otimes I \otimes Z \otimes X\}$, eis as motivações últimas deste importante algoritmo.

A dissertação que hora se apresenta, introduz a codificação em múltiplas bases (MBE), naturalmente, não como um estudo de algoritmo em si, mas, o seu uso que se constituiu em uma técnica contumaz para a resolução do PCV, naturalmente, trata-se esta de uma aplicação para algoritmos de otimização quântica. O que pode-se verificar na literatura o seu uso em essência, não aplicado a um problema concreto, já evidenciava vantagens computacionais em um conjunto diverso de grafos, que excede o do VQE usando o mesmo circuito *Ansatz*, de acordo com a literatura, também proporcionou melhorias significativas de eficiência em relação a outros VQAs que codificam uma variável por qubit para problemas de otimização clássicos, aprioristicamente, este formalismo trouxe uma redução por fator de dois, o que em última instância reduziria o número de qubits necessários para a resolução de problemas, particularmente em problemas de

otmização combinatória que se utilizam de um grande número de variáveis, isso seria conveniente, incluindo-se a priori, as bases X e Z , podendo acrescentar-se outras, de acordo com a conveniência e eficiência egressa de experimentos, este assunto pode ser escopo de trabalhos futuros que poderão explorar com maior profundidade este assunto indicando caminhos.

Não obstante, simulado usando *Ansätze* classicamente tratáveis, o desempenho do algoritmo se locupleta do aumento da profundidade do circuito. Na mesma proporção em que a complexidade da simulação clássica aumenta exponencialmente na profundidade do circuito, isso indica que as MBEs podem desfrutar de vantagens quânticas significativas em escala. O algoritmo MBE pode ser expandido para uma ampla estrutura de codificações de qubits multieixos, que incluiria qualquer função de custo quântico não linear que permita a otimização de múltiplos observáveis mutuamente regularizáveis em um único qubit.

Naturalmente, todos estes fatos decorrerão de mais pesquisas e trabalhos futuros para sua elucidação, o mesmo deu-se quando da necessidade de se incluir a priori, o algoritmo PCE, mesmo não tendo uma figuração direta nos resultados egressos desta dissertação, apontou caminhos para trabalhos futuros e melhorias no arcabouço computacional. Essas conjecturas provavelmente estimularão pesquisas adicionais em codificações de qubits eficientes e a aplicação de outras técnicas aos algoritmos, tanto MBEs, quanto PCE, em suma, o uso de múltiplas bases potencializa resoluções, apresenta resultados com maior rapidez, não obstante, é o início do uso deste arcabouço para a resolução de problemas de otimização combinatória, que com outros trabalhos e pesquisas, em áreas como grafos topológicos, geometria, teoria dos fibrados, topologia algébrica podem servir de sustentáculo aos algoritmos ou mesmo motivar a estruturação de outros algoritmos que serviriam de forma coadjuvante com a MBE, que envolve elementos destas áreas de maneira implícita, isto é igualmente, assuntos para motivas pesquisas e trabalhos futuros.

Concluimos que a computação quântica variacional oferece um caminho viável e promissor para resolver instâncias do PCV e problemas correlatos. As técnicas analisadas, em especial a codificação em múltiplas bases, abrem novas perspectivas para o desenvolvimento de algoritmos mais eficientes em dispositivos quânticos de médio porte. Trabalhos futuros poderão aprofundar essa abordagem com instâncias maiores, circuitos mais profundos, simulações com ruído e integração com técnicas clássicas de aprendizado de máquina.

Referências Bibliográficas

- [1] Klaus Jansen. Exactly characterizable parameter settings in a crossoverless evolutionary algorithm. SIAM Journal on Computing, 35:110–119, 2005.
- [2] Aaishwarya Bajaj. Solution of uncertain constrained multi-objective travelling salesman problem with aspiration level based multi objective quasi oppositional jaya algorithm. World Scientific, 32:209–253, 2024.
- [3] Jarrod R McClean, Jonathan Romero, Ryan Babbush, and Alán Aspuru-Guzik. The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms. New Journal of Physics, 18(2):023023, 2016.
- [4] Ivan Medina, Alexandre Drinko, Guilherme I. Correr, Pedro C. Azado, and Diogo O. Soares-Pinto. Variational-quantum-eigensolver-inspired optimization for spin-chain work extraction. Phys. Rev. A, 110:012443, Jul 2024.
- [5] Alexandre Drinko, Guilherme I. Correr, Ivan Medina, Pedro C. Azado, Askery Canabarro, and Diogo O. Soares-Pinto. Benchmarking variational quantum eigensolvers for entanglement detection in many-body hamiltonian ground states. 2024.
- [6] John Preskill. Quantum computing in the nisq era and beyond. Quantum, 2:79, 2018.
- [7] Frank Leymann and Johanna Barzen. The bitter truth about gate-based quantum algorithms in the nisq era. Quantum Science and Technology, 5(4):044007, 2020.
- [8] Taylor L. Patti, Jean Kossaifi, Anima Anandkumar, and Susanne F. Yelin. Variational quantum optimization with multibasis encodings. Phys. Rev. Res., 4:033142, Aug 2022.
- [9] Michael A. Nielsen and Isaac Chuang. Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press, 2010.

- [10] Mark Lewis and Fred Glover. Quadratic unconstrained binary optimization problem pre-processing: theory and empirical analysis. Arxiv:1705.09844, 2017.
- [11] Palak Sukharamwala and Manojkumar Parmar. Mapping of real world problems to nature inspired algorithm using goal based classifications and and triz. Arxiv:2010.03795, 2020.
- [12] Richard W. Conway, William L Maxwell, and Louis W Miller. Theory of Scheduling. Baker & Taylor, 2003.
- [13] Kazuro Kimura et. al. Accelerating the held-karp algorithm for the symmetric traveling salesman problem. IEICE TRANS. INF. & SYST., E102-D(12):2329–2340, 2019.
- [14] G. Gutin A. Yeo and A. Zverovich. Traveling salesman should not be greedy: domination analysis of greedy-type heuristics for the tsp. Discrete Applied Mathematics, (117), 2002.
- [15] Shen Lin. Computer solutions of the traveling salesman problem. Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), 44(5):563–591, 1965.
- [16] Marco Dorigo and Luca Maria Gambardella. Computer solutions of the traveling salesman problem. Biosystems, 43(2):73–81, 1997.
- [17] Viktoriia A. Slugina René van Beverna. A historical note on the $3/2$ -approximation algorithm for the metric traveling salesman problem. Arxiv:2004.02437, 2020.
- [18] Julia Robinson. On the hamiltonian game (a traveling salesman problem). Technical report. RAND PROJECT AIR FORCE ARLINGTON VA, 1949.
- [19] Mordecai Avriel. Nonlinear programming: analysis and methods. Dover Publications, 2003.
- [20] Andrew Lucas. Ising formulations of many np problems. Arxiv:1302.5843, 2014.
- [21] Iuri Ivanovitch Manin. Вычислимое и невычислимое. Советское Радио, 1980.
- [22] Paul Benioff. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical hamiltonian model of computers as represented by turing machines. Journal of Statistical Physics, 22(5):563–591, 1980.
- [23] Richard P. Feynman. Simulating physics with computers. International Journal of Theoretical Physics, 21(6):467–488, 1982.
- [24] P. Hammer and S. Rudeanu. Boolean methods in operations research. Springer, 1968.

- [25] C. Witzgall. Mathematical methods of site selection for electronic message systems (ems). NBS Internal report, NBS, jun 1975.
- [26] R. E. Miller and eds. J.W.Thatcher. Complexity of computer computations. lenum Press, 1972.
- [27] M.R.Garey and D.S. Johnson. Computers and intractability: a guide to the theory of NP-completeness. W.H. Freeman and Company, 1979.
- [28] F. Rendl, G. Rinaldi, and A. Wiegele. Solving max-cut to optimality by intersecting semidefinite and polyhedral relaxations. Mathematical Programming, 121(2):307–335, 2010.
- [29] E. Boros and P. L. Hammer. pseudo-boolean optimization. Discrete Applied Mathematics, 123:155–225, 2002.
- [30] Fred Glover, Gary Kochenberger, and Yu Du. Quantum bridge analytics i: a tutorial on formulating and using qubo models. Arx:1811.11538, 2019.
- [31] Atanu Rajak et al. Quantum annealing: An overview. Arxiv: 2207.01827, 2023.
- [32] Nittin Rathi et al. Solution of a large-scale traveling-salesman problem. ACM Computing Surveys, 55(12):1–47, 2023.
- [33] Steve Furber. Large-scale neuromorphic computing systems. Journal of Neural Engineering, 13:1–14, 2016.
- [34] Catherine D. Schuman et al. Opportunities for neuromorphic computing algorithms and applications. Nature Computational Science, 2:10–19, 2022.
- [35] Calude C.S., M.J.Dinneen, and R.Hua. Qubo formulations for the graph isomorphism problem and related problems. Theoretical Computer Science, 701:54–69, 2017.
- [36] Guillaume Chapuis et. al. Finding maximum cliques on the d-wave quantum annealer. Arxiv:1801.08649, 2018.
- [37] Tiphaine Viard, Matthieu Latapy, and Clémence Magnien. Computing maximal cliques in link streams. Theoretical Computer Science, 609:1–13, 2016.
- [38] Thomas Krauss. Solving the max-flow problem on a quantum annealing computer. IEEE Transactions on Quantum Engineering, 1:1–10, 2020.

- [39] Elijah Pelofske, Georg Hahn, and Hristo Djidjev. Advanced anneal paths for improved quantum annealing. Arxiv:2009.05008, 2020.
- [40] Michel X. Goemans and David P. Williamson. Improved approximation algorithms for maximum cut and satisfiability problems using semidefinite programming. Journal of the Association for Computing Machinery, 42(6), 1995.
- [41] F. Liers and G. Pardella. A simple max-cut algorithm for planar graphs, 2009.
- [42] et. al. Fred Glover. Quantum bridge analytics i: a tutorial on formulating and using qubo models. Annals of Operations Research, 314:141–183, 2022.
- [43] et. al. C. Bauckhage. Characterization of qubo reformulations for the maximum k-colorable subgraph problem. In Quantum Information Processing, page 54–63, 2019.
- [44] et. al. Seo Hong. Market graph clustering via qubo and digital annealing. Arxiv:2006.10716, 2020.
- [45] Ming-Jing Zhao et al. The l_1 norm of coherence of assistance. Arxiv: 2002.03823, 2020.
- [46] Prasanna Date, Davis Arthur, and Lauren Pusey-Nazzaro. Qubo formulations for training machine learning. Arxiv:2008.02369, 2020.
- [47] Vladimir Vargas-Calderón. Many-qudit representation for the travelling salesman problem optimisation. Arxiv:2102.13298, 2021.
- [48] Ali Shokouhi Rostami et al. Solving multiple traveling salesman problem using the gravitational emulation local search algorithm. Applied Mathematics & Information Sciences, 9(2):699–709, 2015.
- [49] Taylor L. Patti et. al. Variational quantum optimization with multi-basis encodings. Physical Review Research, 4:033142–1–033142–12, 2022.
- [50] Michal Stechly. Introduction to variational quantum algorithms. Arxiv:2402.15879, 2024.
- [51] Dmitry A. Fedorov et al. Vqe method: a short survey and recent developments. Materials Theory, 6(2), 2022.
- [52] Jarrod R. McClean. Barren plateaus in quantum neural network training landscapes. Nature Communications, 9:1–6, 2018.

- [53] Wirawat Kokaew et. al. Multibasis encodings in recurrent neural network wave functions for variational optimization, 2023.
- [54] W. P. Wolf. The ising model and real magnetic materials. Brazilian Journal of Physics, 30(4):794–810, 2000.
- [55] Wolschin Anton Kabelac. One and two-dimensional ising model, 2021.
- [56] G.A.T.F. da Costa and A. L. Maciel. Combinatorial formulation of ising model revisited. Revista Brasileira de Ensino de Física, 15(1), 2003.
- [57] F. Hadlock. Finding a maximum cut of a planar graph in polynomial time. SIAM Journal on Computing, 4:221–225, set 1975.
- [58] Martín Larocca et al. Quantum cognitive triad: semantic geometry of context representation. Arxiv:2105.14377v3, 2022.
- [59] Ang Li et. al. Deep quantum circuit simulations of low-energy nuclear states. European Journal of Physics A, 60(106):3–17, mai 2024.
- [60] David Fitzek et al. Optimizing variational quantum algorithms with qbang: efficiently interweaving metric and momentum to navigate flat energy landscapes. Arxiv:2304.13882v2, 2024.
- [61] Jack Cunningham and Jun Zhuang. Investigating and mitigating barren plateaus in variational quantum circuits: a survey. Arxiv:2407.17706v1, 2024.
- [62] Samson Wang et al. Noise-induced barren plateaus in variational quantum algorithms. Nature Communication, 12:1–11, 2021.
- [63] Abdelkader Sbihi and Richard W. Eglese. Combinatorial optimization and green logistics. A Quarterly Journal of Operations Research, 5(2):99–116, 2007.
- [64] Daniel Harlow. Jerusalem lectures on black holes and quantum information. Arxiv:1409.1231, 2022.
- [65] Stephen William Hawking and George Francis Rayner Ellis. The large scale Structure of Space-time. Cambridge Monographs on Mathematical Physics, 1994.

- [66] YH. et al Shi. Overview of computer architecture development direction breaking through von neumann architec. Nat. Commun., 14(3263):1–7, 2023.
- [67] Steven G. Avery. Qubit models of black hole evaporation. Arxiv:1109.2911, 2012.
- [68] Roger Penrose. Techniques of differential topology in relativity. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1987.
- [69] Kento Osuga and Don N. Page. Qubit transport model for unitary black hole evaporation without firewalls. Arxiv: 1607.04642, 2018.
- [70] Jules Tilly et al. The variational quantum eigensolver: a review of methods and best practices. Arxiv:2111.05176, 2022.
- [71] Robin J. Wilson. Introduction to the graph theory. Prentice Hall, 1996.
- [72] Richard J.Trudeau. Introduction to the graph theory. Pearson Education, Inc., 1993.
- [73] Marc Distel et al. Powers of planar graphs, product structure, and blocking partitions. Arxiv:2308.06995, 2024.
- [74] David Joyner, Minh Van Nguyen, and Nathann Cohen. Algorithmic graph theory, 2013.
- [75] Nicholas Yong. An introduction to Hilbert space. Cambridge University Press, 1988.
- [76] Peter W. Shor. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. Arxiv:/9508027, 1996.
- [77] Edgard Muñoz-Coreas and Himanshu Thapliyal. Everything you always wanted to know about quantum circuits. Arxiv:2208.11725, 2022.
- [78] Felix Bloch. Nuclear induction. Phys. Rev., 70:460–474, Oct 1946.
- [79] Roberto Ferrara et. al. The computational and latency advantage of quantum communication networks. Arxiv:210603360v1, 2021.
- [80] Andrei Nikolaevich Kolmogorov. Вычислимое и невычислимое, 1933.
- [81] Vladimir Dzhunushaliev et al. Dirac/rarita-schwinger plus maxwell theories in $\mathbb{R} \times \mathbb{S}^3$ spacetime in the hopf coordinates. Arxiv:2008.01076, 2020.

- [82] Anna Yershova et al. Generating uniform incremental grids on $so(3)$ using the hopf fibration. Int. J. Rob. Res., 29(7), 2010.
- [83] Zachary Treisman. A yong person´s guide to the hopf fibration. Arxiv:0908.1205, 2009.
- [84] Sean M. Carroll and Ashmeet Singh. Noise-induced barren plateaus in variational quantum algorithms. Phys. Rev., 103:1–39, 2021.
- [85] Bas Janssens. Algorithmic graph theory, 2024.
- [86] Ivan B. Djordjevic. Quantum information processing, quantum computing, and quantum error correction an engineering approach. Springer, 2021.
- [87] John M. Martinis et. al. Decoherence of a superconducting qubit due to bias noise. Phys. Rev. B, 67:094510, Mar 2003.
- [88] Xiaoting Wang and Sonia Schirmer. Analysis of lyapunov method for control of quantum systems. Arxiv:0801.0702, 2008.
- [89] Wolfgang Dü and Stefan Heusler. What we can learn about quantum physics from a single qubit. Arxiv:1312.1463, 2013.
- [90] Katarzyna Siudzinska and Dariusz Chruscinski. Decoherence of a qubit as a diffusion on the bloch sphere. Arxiv:1506.0629, 2018.
- [91] Reinhold A. Bertlmann and Philipp Krammer. Bloch vectors for qudits. Arxiv:0806.1174, 2008.
- [92] G. Wendin and Vitaly Shumeiko. Superconducting quantum circuits, qubits and computing. Arxiv:0508729v1, 2005.
- [93] Ralph Abraham et. al. Foundations of Mechanics. Addison-Wesley Publishing Company, 1980.
- [94] Dongryul Kim. A rough guide to linear algebera. Stanford University, 2020.
- [95] Loring W. Tu. Introduction to manifolds. Springer, 2010.
- [96] Ray M. Bowen and C.-C. Wang. Introduction to vectors and tensors linear and multilinear algebra. Texas AM University, 2010.

- [97] Jürgen Audretsch. Entangled systems: new directions in quantum physics. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2007.
- [98] Eleanor G. Rieffel and Wolfgang H. Polak. Quantum computing: a gentle introduction. MIT Press, 2014.
- [99] Christian de Ronde. Quantum superpositions and the representation of physical reality beyond measurement outcomes and mathematical structures. Arxiv:1603.06112, 2017.
- [100] Guillaume Aubrun et. al. Entanglement and superposition are equivalent concepts in any physical theory. Arxiv:2109.04446, 2021.
- [101] Gregg Jaeger. Entanglement, Information, and the Interpretation of Quantum Mechanics. The Frontiers Collection. Springer, 2009.
- [102] J. J. Sakurai and Jim Napolitano. Modern quantum mechanics. Cambridge University Press, 2021.
- [103] Shan Gao. Meaning of the wave function. Arxiv:org/pdf/1001.5085, 2010.
- [104] Anna Blanco Cabanillas. p-adic groups in quantum mechanics. Universitat de Barcelona, 2022.
- [105] N. N. Bogolubov et. al. Algebra of observables and state space. Springer, Dordrecht, 1990.
- [106] Jürg Fröhlich and Baptiste Schubnel. Quantum probability theory and the foundations of quantum mechanics. Arxiv:1310.1484, 2015.
- [107] Adrian Kent. The measurement postulates of quantum mechanics are not redundant. Arxiv:2307.06191, 2023.
- [108] B. E. Mitchell. Unitary transformations. Canadian Journal of Mathematics, 6, 1954.
- [109] Michael Dickson. Non-relativistic quantum mechanics. North-Holland, 2007.
- [110] W.H. Greub. Linear algebra. Springer, 1975.
- [111] Charles W.Curtis. Linear algebra: an introductory approach. Springer-Verlag, 1984.
- [112] J. B. Conway. A course in functional analysis. Springer Verlag, 1990.

- [113] Robert S.Doran and Victor A. Belfi. Characterizations of C*-algebras: the Gelfand-Naimark theorems. Marcel Dekker, 1986.
- [114] Giuliano Benenti, Giulio Casati, and Giuliano Strini. Quantum gates and universality i. C/CS/Phys C191, pages 1–4, 2007.
- [115] Björn Roos. Ab initio methods in quantum chemistry part 2. Advances in Chemical Physics, 102:6648–6653, 2005.
- [116] Adriano Barenco et. al. Elementary gates for quantum computation. Arxiv:9503016, 1995.
- [117] Adriano Barenco et. al. Elementary gates for quantum computation. Arxiv:9503016, 1995.
- [118] JJoão Marcos Costa da Silva Matheus Pereira Lobo. A magia das portas quânticas. Open Journal of Mathematics and Physics, 3:1–23, dec 2022.
- [119] et. al. Askery Canabarro. Quantum finance: um tutorial de computação quântica aplicada ao mercado financeiro. Revista Brasileira de Ensino de Física, 44:17, 2022.
- [120] Konstantin Sakharovskiy. Universal quantum gates, 2022.
- [121] Konstantin Sakharovskiy. Universal quantum gates, Bachelors Thesis in Information Technology. University of Jyväskylä Faculty of Information Technology, 2022.
- [122] Tom M. Apostol. Another elementary proof of euler’s formula for $\zeta(2n)$. Mathematical Association of America, 80:425–431, 1973.
- [123] Dengkui Jiang et. al. Generating bell states and werner states of two qubits via optical field. Arxiv:2401.07574, 2024.
- [124] Richard P. Feynman. Quantum mechanical computers. Optics News, 11(2):11–20, 1985.
- [125] Giuliano Benenti, Giulio Casati, and Giuliano Strini. Principles of quantum computation and information: vol. II: Basic Tools and Special Topics, volume 2. World Scientific, 2007.
- [126] David P. DiVincenzo. Quantum memory: a missing piece in quantum computing units. Arxiv:0002077, 2000.
- [127] George Rajna. Flying qubits, 2024.

- [128] D. Fernández-Fernández, Yue Ban, and G. Platero. Flying spin qubits in quantum dot arrays driven by spin- orbit interaction. Arxiv: 2312.04631, 2024.
- [129] Nilanjana Datta. Quantum information & computation, 2020.
- [130] Lluís Masanes, Thomas D. Galley, and Markus P. Müller. The measurement postulates of quantum mechanics are operationally redundant. Nature Communications, 10(1361):1–6, 2019.
- [131] A. C. Tort. Mecânica quântica o processo de medida em mq, 2015.
- [132] Diego Barberena¹ and Aaron J. Friedman. Overview of projective quantum measurements. Arxiv:2404.05679v1, 2024.
- [133] H. D. Ikramov. канонической форме проекторов относительно унитарного подобия. Jornal de Computação matemática e física matemática, 36(3):3–5, 1996.
- [134] Sevag Gharibian. Measurement and quantum teleportation, 2015.
- [135] Mikio Nakahara and Tetsuo Ohmi. Quantum Computing from linear algebra to physical realizations. CRC Press, 2008.
- [136] D. J. Griffiths. Introduction to quantum mechanics. Pearson Prentice Hall, 2004.
- [137] J. J. Sakurai and J. Napolitano. Modern Quantum Mechanics. Cambridge University Press, 2017.
- [138] et. al. Kun Fang. Dynamic quantum circuit compilation. Arxiv:2310.11021, 2023.
- [139] Roger Penrose. Applications of Negative Dimensional Tensors. Academic Press Inc., 1971.
- [140] M. Kubale. History of graph coloring. American Mathematical Society, 2004.
- [141] Amit Singh et. al. Quantum annealing approach for the optimal real-time traffic control using qubo. Arxiv:2403.09023, 2024.
- [142] Chris Peters and Hans Sterk. Symmetric and quadratic forms, with applications to coding theory, algebraic geometry and topology, 2024.
- [143] Vasile Moraru and Sergiu Zaporozhan. A continuous reformulation of the quadratic unconstrained binary optimization problem, 2015.

- [144] I. V. Proskuryakov. Problems In Linear Algebra. Mir, 1978.
- [145] Giacomo Orlandi. Qubo models preprocessing toolchain for quantum solvers. Master’s thesis, Politecnico de Torino, Torino, 2023.
- [146] Edward A. Bender and S. Gill Williamson. Sascha mücke and nico piatkowski and katharina morik, 2019.
- [147] Dario De Santis et al. Optimized qubo formulation methods for quantum computing. Arxiv:2406.07681, 2024.
- [148] Wilhelm Lenz. Beiträge zum verständnis der magnetischen eigenschaften in festen körpern. Physikalische Zeitschrift, 21, 1920.
- [149] E. Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. Zeitschrift für Physik, 31(1), 1925.
- [150] Christof Külske. The ising model: highlights and perspectives. Arxiv:2501.05394v1, 2025.
- [151] A. P. Punnen (editor). Quadratic unconstrained binary optimization problem: theory, algorithms, and applications. Springer, 2022.
- [152] E. Çela and A. P. Punnen (editores). Complexity and Polynomially Solvable Special Cases of QUBO. Springer, 2022.
- [153] Adam Naumowicz. A note on the seven bridges of königsberg problem. Formalized Mathematics, 22:177–178, 2016.
- [154] G. B. Dantzig, R. Fulkerson, and S. M. Johnson. Solution of a large-scale traveling-salesman problem. Journal of the Operations Research Society of America, 2(4):393–410, 1954.
- [155] Emran Islam, Mariam Sultana, and Faruque Ahmed. A tale of revolution: Discovery and development of tsp. International Journal of Mathematics Trends and Technology (IJMTT), 57(2):136–139, 2018.
- [156] Beardwood J., J. H. Halton, and J.M. Hammersley. The shortest path through many points. Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 55:118–127, 2020.
- [157] E. L. Lawler. The Travelling Salesman Problem: A Guided Tour of Combinatorial Optimization. John Wiley & sons, 1985.

- [158] Анатолий Сердюков. О некоторых экстремальных обходах в графах. Управляемые системы, 17:76–79, 1978.
- [159] G. Reinelt. TspLib - a traveling salesman problem library. ORSA Journal on Computing, 3(4):376–38, 1991.
- [160] César Rego et. al. Traveling salesman problem heuristics: leading methods, implementations and latest advances. European Journal of Operational Research, 211(3):427–441, 2011.
- [161] Anna R. Karlin, Nathan Klein, and Shayan Oveis Gharan. Quantum algorithms: an overview. Arx:2007.01409, 2023.
- [162] Richard M. Karp in: R. E. Miller and J. W. Thatcher (eds.). Reducibility among combinatorial problems in: Complexity of Computer Computation. Plenum Press, 1972.
- [163] Melise Maria Veiga de Paula. Heurísticas e metaheurísticas para o problema do caixeiro viajante com grupamentos. Tese de mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro, Brasil, Dezembro 2001.
- [164] Daniel Pedoe. Geometry: a comprehensive course. Dover, 1988.
- [165] Sanjeeves Arora. Polynomial time approximation schemes for euclidean traveling salesman and other geometric problems. Journal of the ACM, 45(5):753–782, 1998.
- [166] Vera Traub and Jens Vygen. An improved approximation algorithm for ats. Arxiv:1912.00670, 2021.
- [167] M. Karpinski, M. Lampis, and R. Schmied. Some geometric results in semidefinite programming. Journal of Global Optimization, 7(1), 2015.
- [168] Richard Bellman. Dynamic programming treatment of the travelling salesman problem. Journal of the Association for Computing Machinery, 9, 1962.
- [169] Michael Held and Richard M. Karp. Dynamic programming treatment of the travelling salesman problem. Journal for the Society for Industrial and Applied Mathematics, 10(1), 1962.
- [170] Quang Nhat Nguyen. Travelling salesman problem and bellman-held-karp algorithm, 2020.

- [171] Martin Grohe. The graph isomorphism problem. Communications of the ACM, 63:128–134, 2020.
- [172] Leo Zhou, Sheng-Tao Wang, Soonwon Choi, Hannes Pichler, and Mikhail D. Lukin. Quantum approximate optimization algorithm: Performance, mechanism, and implementation on near-term devices. Phys. Rev. X, 10:021067, Jun 2020.
- [173] Askery Canabarro et al. Quantum finance: um tutorial de computação quântica aplicada ao mercado financeiro. Arxiv:2208.04382, 2022.
- [174] et. al. Alberto Peruzzo. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. Nature Communications, 5:1–7, jul 2014.
- [175] Dmitry A. Fedorov et al. Vqe method: a short survey and recent developments. Arxiv: 2103.08505, 2021.
- [176] Alberto Peruzzo. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. Nature Communications, 5(1), 2014.
- [177] Kishor Bharti et. al. Noisy intermediate-scale quantum (nisq) algorithms. Arxiv: 2101.08448, 2021.
- [178] F. Barahona, M. Jünger, and G. Reinelt. Experiments in quadratic 0 – 1 programming. Mathematical Programming, 44:127–137, 1989.
- [179] P. L. Hammer. Some network flow problems solved with pseudo-boolean programming. Operations Research, 13:388–399, 1965.
- [180] et. al. Wirawat Kokaew. Multibasis encodings in recurrent neural network wave functions for variational optimization, 2023.
- [181] Monit Sharma and Hoong Chuin Lau. A comparative study of quantum optimization techniques for solving combinatorial optimization benchmark problems. Arxiv:503.12121, 2025.
- [182] Allen Hatcher. Algebraic Topology. Cambridge University Press, 2002.
- [183] J. H. Rubinstein. In An algorithm to recognize the 3-sphere, page 601–611, 1994.

- [184] Abigail Thompson. Thin position and the recognition problem for S^3 . Mathematical Research Letters, 1:613–630, 1994.
- [185] Saul Schleimer. Sphere recognition lies in np. Arxiv:math/0407047, 2004.
- [186] Raphael Zenter. Integer homology 3-sphere admit irreducible representations in $sl(2, \mathbb{C})$. Arxiv:1605.08530, 2018.
- [187] Daniel Freed and Karen Uhlenbeck. Instantons and four-manifolds,. Springer, 1991.
- [188] William P. Thurston. Three dimensional manifolds, kleinian groups and hyperbolic geometry. American Mathematical Society, 6(3), 1982.
- [189] Greg Kuperberg. Knottedness is in np, modulo grh. Arxiv:1112.0845, 2014.
- [190] Wirawat Kokaew et al. Benjamin a. burton, s/d.
- [191] Benjamin Andrew Burton. Minimal Triangulations and normal surfaces. PhD thesis, Department of Mathematics and Statistics The University of Melbourne, 2003.
- [192] Renato Gomes dos Reis. Geometrias de thurston: uma abordagem utilizando topologia computacional. Interciência & Sociedade - Revista Eletrônica, 3(1):29–35, 2014.
- [193] Benjamin A. Burton, J. Hyam Rubinstein, and Stephan Tillmann. The weber-seifert dodecahedral space is non-haken. Arxiv:0909.4625, 2010.
- [194] Jason Manning. Algorithmic detection and description of hyperbolic structures on closed 3-manifolds with solvable word problem. Arxiv:math/0102154, 2002.
- [195] Willian Jaco and Peter B. Shalen. Seifert fibered spaces in irreducible, sufficiently-large 3-manifolds. BULLETIN OF THE AMERICAN MATHEMATICAL SOCIETY, 82(5):765–767, 1979.
- [196] Klaus Johannson. Homotopy equivalences of 3-manifolds with boundary. Springer Lecture Notes, 1979.
- [197] S. Matveev. Algorithmic topology and the classification of 3-manifolds. Springer-Verlag, 2003.
- [198] Francesco Constantino and Dylan Thurston. 3-manifolds efficiently bound 4-manifolds. Arxiv:math/0506577, 2007.

- [199] William Jaco and J. Hyam Rubinstein. Layered-triangulations of 3-manifolds. Arxiv:0603601, 2006.
- [200] Agol Ian, Joel Hass, and William Thurston. The computational complexity of knot genus and spanning area. Arxiv:0205057, 2004.
- [201] Marc Lackenby. The efficient certification of knottedness and thurston norm. Arxiv:1604.00290, 2024.
- [202] Joel Hass, Jeffrey C. Lagarias, and Nicholas Pippenger. The computational complexity of knot and link problems. Arxiv:9807016, 2024.
- [203] Franco P. Preparata and Michael Ian Shamos. Computational geometry-an introduction. Springer-Verlag, 1985.
- [204] A.R. Forrest. Computational geometry. Proc. Royal Society London, 321(1545):187–195, 1971.
- [205] Ralph Abraham and Jerrold E. Marsden. Foundations of mechanics. AMS CHELSEA PUBLISHING, 2008.
- [206] Michael Shell, John Doe, and Jane Doe. Warm-starting qaoa with xy mixers: a novel approach for quantum-enhanced vehicle routing optimization. Journal of **LaTeX** Class Files, 14(8), 2015.
- [207] Xie Chen and Ashvin Vishwanath. Towards gauging time-reversal symmetry: a tensor network approach. PHYSICAL REVIEW X, 5(041034):1–18, 2015.
- [208] Gregory Gutin and Abraham P. Punnen (Eds.). Combinatorial optimization. Springer, 2007.
- [209] et al N. P. de Leon. Materials challenges and opportunities for quantum computing hardware. Science, 372(253):1–19, 2021.
- [210] Tullio Levi-Civita. Lezione de calcolo difrentiale asolluto. Alberto Stock - Editore, 1923.
- [211] M. Spivak. A comprehensive introduction to differential geometry. Vol. 1. Publish or Perish Inc., 1999.

- [212] Román Orús. A practical introduction to tensor networks: matrix product states and projected entangled pair states. Arxiv:1306.2164, 2014.
- [213] Jacob Biamonte and Ville Bergholm. Quantum tensor networks in a nutshell. Arxiv:1708.00006, 2017.
- [214] Glen Evenbly. A practical guide to the numerical implementation of tensor networks i: contractions, decompositions and gauge freedom. Arxiv:2202.02138, 2022.
- [215] R. Penrose. Applications of negative dimensional tensors. Combinatorial Mathematics and its Applications, 1:221–244, 1971.
- [216] Steven Abreu. Concepts and paradigms for neuromorphic programming. Arxiv:2310.18260, 2023.
- [217] FL Hitchcock. The expression of a tensor or a polyadic as a sum of products. Journal of Mathematics and Physics, 6:164–189, 1927.
- [218] Oscar Mickelin and Sertac Karaman. On algorithms for and computing with tensor ring decomposition. Arxiv:1807.02513, 2020.
- [219] LR Tucker. Some mathematical notes on three-mode factor analysis. Psychometrika, 31(3):279–311, 1966.
- [220] D. Perez-Garcia et al. Matrix product state representations. Arxiv:0608197, 2007.
- [221] Ulrich Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. Arxiv:1008.3477, 2011.
- [222] B. N. Khoromskij. $O(\log n)$ -quantics approximation of $n - d$ tensors in high-dimensional numerical modelin. Constr Approx., 34(2):257–280, 2011.
- [223] Qibin Zhao. Tensor ring decomposition. Arxiv:1606.05535, 2016.
- [224] Juneseo Lee et al. Progress toward favorable landscapes in quantum combinatorial optimization. Arxiv:2105.01114, 2021.
- [225] Maria Schuld et. al. Evaluating analytic gradients on quantum hardware. Arxiv:1811.11184, 2018.

- [226] Matthew P. Harrigan et al. Quantum approximate optimization of non-planar graph problems on a planar superconducting processor. [Arxiv:2004.04197](#), 2021.
- [227] Taylor L. Patti et al. Tensorly-quantum: Quantum machine learning with tensor methods. [Arxiv:2112.10239](#), 2021.
- [228] G. Catarina and Bruno Murta. Density-matrix renormalization group: a pedagogical introduction. [Arxiv:2304.13395](#), 2023.
- [229] U. Schollwöck. The density-matrix renormalization group. [Arxiv:0409292](#), 2004.
- [230] Density matrix formulation for quantum renormalization groups. [Phys. Rev. Lett.](#), 69(2863), 1992.
- [231] Jonathan Wurtz and Peter Love. Maxcut qaoa performance guarantees for $p > 1$. [Arxiv:2010.11209](#), 2021.
- [232] J. Wurtz and P. Love. Maxcut quantum approximate optimization algorithm performance guarantees for $p > 1$. [Phys. Rev. A](#), 103(042612), 2021.
- [233] Juan R. Terven, Diana M. Cordova-Esparza, and Alfonso Ramirez-Pedraza. Loss functions and metrics in deep learning. [Arxiv: 2307.02694](#), 2025.
- [234] Run-Hong He et al. Modularized and scalable compilation for double quantum dot quantum computing. [Arxiv: 2211.05300](#), 2023.
- [235] Wirawat Kokaew et al. Multibasis encodings in recurrent neural network wave functions for variational optimization, 2023.
- [236] Andrew Eddins et al. Doubling the size of quantum simulators by entanglement forging. [Arxiv:2104.10220](#), 2021.
- [237] Michael Motta et al. Entanglement clustering for ground-stateable quantum many-body states. [Arxiv:2004.06141](#), 2020.
- [238] Xun Gao. Enhancing generative models via quantum correlations. [Arxiv: 2101.08354](#), 2021.
- [239] K. I. Aardal and R. Weismantel. [Polyhedral combinatorics: an annotated bibliography.](#) Universiteit Utrecht, 1996.

- [240] M. Cerezo et. al. Cost function dependent barren plateaus in shallow parametrized quantum circuits. Arxiv:2001.00550, 2021.
- [241] Matthew B. Hastings. Classical and quantum bounded depth approximation algorithms. Arx:1905.07047, 2019.
- [242] Bryce Fuller et al. Approximate solutions of combinatorial problems via quantum relaxations. Arxiv:2111.03167, 2021.
- [243] Tom M. Apostol. Mathematical Analysis. Addison Wesley Publishing Company, 1981.
- [244] Raunak Kundagrami. Hopf fibrations, 2020.
- [245] Michal Zamboj. Synthetic construction of the hopf fibration in a double orthogonal projection of 4-space. Arxiv:2003.09236, 2021.
- [246] Stephen Gull, Anthony Lasenby, and Chris Doran. Imaginary numbers are not real — the geometric algebra of spacetime. Found. Phys., 23(9):1175–1201, 1993.
- [247] Torsten Asselmeyer-Maluga. Topological quantum computing and 3-manifolds. Quantum Rep., 3:153–165, 2021.

Apêndice A

Topologia

Nesta seção do apêndice, apresentar-se-á definições e noções básicas de topologia que podem ser úteis caso o leitor não esteja familiarizado com o tópico, dar-se-á alguns tópicos de topologia e de uma subárea em particular, a topologia computacional.

A.1 Topologia Geral

Topologia geral é o ramo da topologia que lida com as definições e construções básicas da teoria dos conjuntos usadas nesta área. Serve de base da maioria dos outros ramos da topologia, incluindo topologia diferencial, topologia geométrica e topologia algébrica.

Definição A.1.1 (Topologia). *Dado um conjunto não vazio X , uma topologia τ em X é uma coleção de subconjuntos de X , cujos quais denominam-se conjuntos abertos, que satisfazem as seguintes propriedades:*

- *O conjunto X e $\emptyset$ estão contidos em τ ;*
- *Se $\mathcal{U} \in \tau$ e $\mathcal{V} \in \tau$, então $\mathcal{U} \cap \mathcal{V} \in \tau$;*
- *Se I for um conjunto arbitrário de índices e U_i for uma coleção de conjuntos abertos de X para $\forall i \in I$, então $U_{i \in I} \in \tau$ trata-se de um conjunto aberto de X .*

Observação A.1.1. *Notes-se que o item dois implica que uma interseção finita de conjuntos abertos é um conjunto aberto.*

Definição A.1.2 (Espaço Topológico). *Denominar-se-á doravante, um par ordenado (X, τ) de espaço topológico.*

Observação A.1.2. Quando a topologia é implícita, é comum denotar o espaço topológico simplesmente por X .

Exemplo A.1.1. Considere a topologia padrão em $\mathbb{R}$.

A.2 Topologia Padrão

A partir do exemplo (A.1.1), pode-se introduzir a seguinte proposição:

Proposição A.2.1. Um subconjunto $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}$ é aberto se for vazio ou se $\forall x \in \mathcal{U}$ existir um $\epsilon > 0$, tal que $(x - \epsilon, x + \epsilon) \subset \mathcal{U}$. Todos os subconjuntos abertos de $\mathbb{R}$ definidos desta forma fornecem uma topologia $\tau_{\mathbb{R}}$ denominada topologia padrão.

Prova. Dever-se-á verificar todas as propriedades da Definição (A.1.1).

- Segue-se diretamente que $\mathbb{R}$ e $\emptyset$ são subconjuntos abertos;
- Sejam $\mathcal{U}_1$ e $\mathcal{U}_2$ dois conjuntos abertos. Se $x \in \mathcal{U}_1 \cap \mathcal{U}_2$, então existem ϵ_1 e ϵ_2 , tais que $(x - \epsilon_1, x + \epsilon_1) \subset \mathcal{U}_1$ e $(x - \epsilon_2, x + \epsilon_2) \subset \mathcal{U}_2$. Tomando-se o valor mínimo de $\epsilon = \min(\epsilon_1, \epsilon_2)$, tem-se que $(x - \epsilon, x + \epsilon) \subset \mathcal{U}_1 \cap \mathcal{U}_2$, então $\mathcal{U}_1 \cap \mathcal{U}_2$ é aberto.
- Considere uma família $\mathcal{U}_{\lambda}$ de conjuntos abertos. Segue-se que $\bigcup_{\lambda} \mathcal{U}_{\lambda}$ é um conjunto aberto. Se $x \in \bigcup_{\lambda} \mathcal{U}_{\lambda}$, então $x \in \mathcal{U}_{\lambda_0}$ para algum λ_0 . Segue-se que existe algum ϵ tal que $(x - \epsilon, x + \epsilon) \subset \mathcal{U}_{\lambda_0} \subset \bigcup_{\lambda} \mathcal{U}_{\lambda}$. Portanto, o par $(\mathbb{R}, \tau)$ é um espaço topológico.

□

A.3 Definições e Propriedades Importantes

Definição A.3.1 (Homeomorfismo). Sejam X e Y dois espaços topológicos, um mapa $f : X \rightarrow Y$ é dito contínuo se a pré-imagem de um conjunto aberto $B \subset Y$, denotado $f^{-1}(B)$, também é um conjunto aberto de X . Além disso, se f bijetor com inversa contínua então f é um homeomorfismo e os espaços X e Y são homeomorfos. Homeomorfismos são mapas que preservam a estrutura e as propriedades topológicas subjacentes.

Definição A.3.2 (Base). Dado um espaço topológico (X, τ) , uma base para a topologia τ , também denominada base para X trata-se de uma família $\mathcal{B} \subseteq \tau$ de conjuntos abertos tais que cada conjunto aberto da topologia pode ser representado como a união de alguma subfamília de $\mathcal{B}$. Os

elementos de $\mathcal{B}$ são denominados de conjuntos abertos básicos. Equivalentemente, uma família $\mathcal{B}$ de subconjuntos de X é uma base para a topologia τ se e somente se $\mathcal{B} \subseteq \tau$ e para todo conjunto aberto U em X e ponto $x \in U$ existe algum conjunto aberto básico $B \in \mathcal{B}$ tal que $x \in B \subseteq U$.

Se $\mathcal{B}$ é uma base para a topologia τ de um espaço X , satisfaz as seguintes propriedades:

Propriedade 1. Os elementos de $\mathcal{B}$ cobrem X , ou seja, todo ponto $x \in X$ pertence a algum elemento de $\mathcal{B}$.

Propriedade 2. Para cada $B_1, B_2 \in \mathcal{B}$ e cada ponto $x \in B_1 \cap B_2$, existe algum $B_3 \in \mathcal{B}$ tal que $x \in B_3 \subseteq B_1 \cap B_2$

Definição A.3.3 (Espaço Quociente). *Seja X um espaço topológico e seja $\sim$ uma relação de equivalência em X . O conjunto quociente $Y = X/\sim$ é o conjunto de classes de equivalência de elementos de X . A classe de equivalência de $x \in X$ é denotada por $[x]$. A construção de Y define uma sobrejeção canônica $q : X \ni x \mapsto [x] \in Y$. Conforme discutido abaixo, q é um mapeamento quociente, comumente chamado de mapa quociente canônico, ou mapa de projeção canônica, associado a $X/\sim$.*

Definição A.3.4 (Mapa Quociente). *Um mapa $f : X \rightarrow Y$ é um mapa quociente se for sobrejetor e Y estiver equipado com a topologia final induzida por f . Esta última condição admite duas formulações mais elementares: um subconjunto $V \subseteq Y$ é aberto (fechado) se e somente se $f^{-1}(V)$ for aberto (respectivamente, fechado). Todo mapa quociente é contínuo, mas a recíproca não é verdadeira.*

Definição A.3.5 (Continuidade). *É expressa em termos de vizinhanças: f é contínua em algum ponto $x \in X$ se e somente se para qualquer vizinhança V de $f(x)$, houver uma vizinhança U de x tal que $f(U) \subseteq V$.*

Definição A.3.6 (Cobertura). *Seja o conjunto X um espaço topológico, então uma cobertura C de X é uma coleção de subconjuntos $\{U_\alpha\}_{\alpha \in A}$ de X cuja união é o espaço inteiro $X = \bigcup_{\alpha \in A} U_\alpha$. Neste caso, diz-se que C cobre X , ou que os conjuntos U_α cobrem X . Se Y é um subespaço (topológico) de X , então uma cobertura de Y é uma coleção de subconjuntos $C = \{U_\alpha\}_{\alpha \in A}$ de X cuja união contém Y . Ou seja, C é uma cobertura de Y se $Y \subseteq \bigcup_{\alpha \in A} U_\alpha$. Aqui, Y pode ser coberto com conjuntos em Y ou conjuntos no espaço pai X .*

Definição A.3.7 (Subcobertura). *Seja C uma cobertura de um espaço topológico X . Uma subcobertura de C é um subconjunto de C que ainda cobre X . A cobertura C é considerada uma cobertura aberta se cada um de seus membros for um conjunto aberto. Ou seja, cada U_α está contido em T , em que T é a topologia em X .*

Definição A.3.8 (Espaços Topológicos Compactos). *Seja um espaço topológico X é denominado compacto se cada uma de suas coberturas abertas possui uma subcobertura finita. Para cada coleção arbitrária $\{U_\alpha\}_{\alpha \in A}$ de subconjuntos abertos de X tais que $X = \bigcup_{\alpha \in A} U_\alpha$, existe um subconjunto finito J de A tal que $X = \bigcup_{i \in J} U_i$.*

Definição A.3.9 (Espaços Conexos). *Um espaço topológico X é dito desconexo se for a união de dois conjuntos abertos não vazios disjuntos. Caso contrário, X é dito conexo. Um subconjunto de um espaço topológico é dito conexo se for conexo sob sua topologia de subespaço.*

A.3.1 Espaços Métricos

Definição A.3.10 (Espaços Métricos). *Trata-se de um par (M, d) em que M é um conjunto e d é uma métrica em M , ou seja, uma função $d: M \times M \rightarrow \mathbb{R}$ tal que para qualquer $x, y, z \in M$, valem as seguintes propriedades:*

- $d(x, y) \geq 0$;
- $d(x, y) = 0$ se e somente se $x = y$;
- $d(x, y) = 0$ se e somente se $x = y$;
- $d(x, y) = d(y, x)$ (simetria);
- $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$ (desigualdade triangular).

A função d também é chamada de função distância ou simplesmente distância. Frequentemente, d é omitido e escreve-se simplesmente M para um espaço métrico se estiver claro no contexto qual métrica é usada. Todo espaço métrico é paracompacto e Hausdorff e, portanto, normal. Os teoremas de metrização fornecem condições necessárias e suficientes para que uma topologia venha de uma métrica.

A.4 Espaços de Hausdorff

A estrutura do espaço topológico descrita anteriormente apresenta um alto grau de generalidade do ponto de vista físico, pode levar a propriedades patológicas, como dificuldades em separar dois pontos distintos em um dado espaço. Por essa razão, é útil considerar os axiomas de separação. Aqui, são apresentados três axiomas de separação diferentes. Observe que esses axiomas são hierarquicamente organizados, ou seja, $(A.4.3) \Rightarrow (A.4.2) \Rightarrow (A.4.1)$.

Definição A.4.1 (T_0). *Um espaço topológico (X, τ) é denominado T_0 , (ou muito menos comumente denominado um espaço de Kolmogorov), se para qualquer par de pontos distintos $x, y \in X$ existe um conjunto aberto U que contém um deles e não o outro.*

Definição A.4.2 (T_1). *Seja um espaço topológico (X, τ) , denomina-se T_1 , ou menos comumente denomina-se de Fréchet, se para qualquer par de pontos distintos $x, y \in X$, existem conjuntos abertos U e V tais que U contém x , mas não y , e V contém y , mas não x .*

Definição A.4.3 (T_2). *Seja um espaço topológico (X, τ) é denominado T_2 , ou espaço de Hausdorff, se para cada par de pontos distintos $x, y \in X$, existem conjuntos abertos disjuntos U e V tais que $x \in U$ e $y \in V$.*

Definição A.4.4. *Seja Um espaço topológico (X, τ) denomina-se regular se para qualquer $x \in X$ e qualquer conjunto fechado C que não contenha x , existem conjuntos abertos disjuntos U e V tais que $x \in U$ e $C \subseteq V$.*

Proposição A.4.1. *Seja (X, τ) regular. Então (X, τ) é T_0 se e somente se for T_1 se e somente se for T_2 .*

Prova. Em qualquer espaço, $T_2 \Rightarrow T_1 \Rightarrow T_0$. Portanto, suponha que X seja regular e T_0 e seja $x \neq y \in X$. Então, pelas características T_0 , sem perda de generalidade, existe um conjunto aberto U contendo x , mas não y . Mas, então $X \setminus U$ é um conjunto fechado que contém y , mas não x , então, por regularidade, existem conjuntos abertos disjuntos V_1 e V_2 contendo C e portanto, y e x , respectivamente. Portanto, x é T_2 e portanto, T_1 . $\square$

A.5 Topologia Computacional

Trata-se de uma subárea da topologia com sobreposição com áreas da ciência da computação, em particular, geometria computacional e teoria da complexidade computacional. Uma dos princi-

país objetos da topologia computacional, é o desenvolvimento de algoritmos eficientes para resolver problemas que surgem naturalmente em áreas como geometria computacional, dentre outras áreas.

A.5.1 Principais Algoritmos por Área Temática

A.5.1.1 Algoritmos para 3-Variedades

Uma grande classe de algoritmos referentes às 3-variedades utilizam-se da teoria de superfícies normais, que é um termo que abrange diversas técnicas para transformar problemas da teoria de 3-variedades em problemas de programação linear inteira.

Definição A.5.1. *Uma triangularização, também denominada triangulação de um espaço topológico X consiste em um complexo simplicial que denominar-se-á K e um homeomorfismo $f : |K| \rightarrow X$, em que $|K|$ é o polítopo de K . Diz-se que um espaço topológico X é triangularizável se existe uma triangulação para X .*

Definição A.5.2 (Superfícies Normais). *Trata-se uma superfície normal daquela que dentro de uma 3-variedade triangularizável que intercepta cada tetraedro em vários componentes denominados discos normais, sendo que cada um destes é um triângulo que corta um vértice do tetraedro ou um quadrilátero que separa pares de vértices. Em um dado tetraedro, não pode haver dois quadriláteros separando diferentes pares de vértices, pois tais quadriláteros se interceptariam em uma reta, fazendo com que a superfície se auto-interseccionasse, [182].*

Algoritmo de reconhecimento da 3-esferas de Rubinstein e Thompson, [183, 184]. Este é um algoritmo que recebe como entrada uma variedades triangularizáveis tridimensionais e determina se a variedade é ou não homeomorfa à 3-esfera. Possui um tempo de execução exponencial no número de simplexes tetraédricos na variedade tridimensional inicial e também um perfil de memória exponencial. Saul Schleimer demonstrou que o problema reside na classe de complexidade NP, [185]. Além disso, Raphael Zentner, [186] demonstrou que o problema reside na classe de complexidade coNP, desde que a hipótese generalizada de Riemann seja válida. Utiliza a teoria de calibre *instanton*, [187], o teorema da geometrização de variedades tridimensionais, [188] e o trabalho subsequente de Greg Kuperberg sobre a complexidade da detecção de nós, [189]. A decomposição em soma conexa de 3-variedades também é implementada em Regina, [190, 191], possui tempo de execução exponencial e é baseada em um algoritmo semelhante ao algoritmo de reconhecimento de 3-esferas, [192]. A determinação de que a 3-variedade de Seifert-Weber não contém superfícies incompressíveis foi implementada algoritmicamente por Burton, Rubinstein e Tillmann e baseada

na teoria de superfícies normais, [193]. O algoritmo de Manning é um algoritmo para encontrar estruturas hiperbólicas em 3-variedades cujo grupo fundamental possui uma solução para o problema da palavra, [194]. Atualmente, a decomposição JSJ, [182, 195, 196], não foi implementada algoritmicamente em softwares. Nem a decomposição de corpos compressivos. Existem algumas heurísticas muito populares e bem-sucedidas, como o *SnapPea*, que tem muito sucesso no cálculo de estruturas hiperbólicas aproximadas em 3-variedades triangularizáveis. Sabe-se que a classificação completa de 3-variedades pode ser feita algoritmicamente, na verdade, sabe-se que decidir se duas 3-variedades fechadas e orientadas dadas por triangulações (complexos simpliciais) são equivalentes (homeomorfas) é uma decisão recursiva elementar. Isso generaliza o resultado na reconhecimento de 3-esferas, [197].

A.5.1.2 Algoritmos de Conversão

O *SnapPea* implementa um algoritmo para converter um diagrama de nó ou enlace planar em uma triangulação cúspide. Este algoritmo possui um tempo de execução aproximadamente linear no número de cruzamentos no diagrama e um perfil de memória baixo. O algoritmo é semelhante ao algoritmo de Wirthinger para a construção de apresentações do grupo fundamental de complementos de enlace fornecidos por diagramas planares, [182]. Da mesma forma, o *SnapPea* pode converter apresentações cirúrgicas de 3-variedades em triangulações da 3-variedade apresentada.

D. Thurston e F. Costantino têm um procedimento para construir uma 4-variedade triangulada a partir de uma 3-variedade triangulada, [198]. Da mesma forma, pode ser usado para construir apresentações cirúrgicas de 3-variedades triangularizadas. Embora o procedimento não seja explicitamente escrito como um algoritmo, em princípio, deve ter um tempo de execução polinomial no número de tetraedros da triangularização da 3-variedades dada. S. Schleimer possui um algoritmo que produz uma 3-variedade triangularizada, recebendo como entrada uma palavra (em geradores de torção de Dehn) para o *mapping class group* de uma superfície, [185]. A 3-variedade é a que utiliza a palavra como mapa de anexação para uma divisão de Heegaard da 3-variedade. O algoritmo baseia-se no conceito de triangulação em camadas, [199].

A.5.1.3 Teoria Algorítmica dos Nós

Sabe-se que determinar se um nó é trivial ou não está incluído nas classes de complexidade NP, bem como co-NP. O problema de determinar o gênero de um nó em uma 3-variedade é NP-completo; no entanto, embora NP permaneça um limite superior para a complexidade de

determinar o gênero de um nó em $\mathbb{R}^3$ ou $\mathbb{S}^3$, em 2006 não se sabia se o problema algorítmico de determinar o gênero de um nó nessas variedades triplas específicas ainda era NP-complexo, [200–202].

Apêndice B

Geometria Computacional

Ramos da geometria computacional são:

Geometria computacional combinatória, também denominado de geometria algorítmica, que lida com objetos geométricos como entidades discretas. A denominação geometria computacional nesse sentido figura em Um livro de 1975, [203].

B.1 Geometria Computacional Numérica

Também denominada de geometria de máquina, projeto geométrico auxiliado por computador (CAGD) ou modelagem geométrica, que lida principalmente com a representação de objetos do mundo físico em formas adequadas para cálculos computacionais em sistemas, como por exemplo, CAD/CAM. Este ramo pode ser visto como um desenvolvimento adicional da geometria descritiva e é frequentemente considerado um ramo da computação gráfica ou CAD. O termo geometria computacional, neste sentido, está em uso desde 1971, [204].

B.2 Geometria Computacional Combinatória

O objetivo principal da pesquisa em geometria computacional combinatória é desenvolver algoritmos e estruturas de dados eficientes para resolver problemas formulados em termos de objetos geométricos básicos: pontos, segmentos de reta, polígonos, poliedros, entre outros.

Alguns desses problemas parecem tão simples que não eram considerados problemas até o advento dos computadores. Considere, por exemplo, o problema do par mais próximo:

Dados n pontos no plano, encontre os dois com a menor distância entre si. Pode-se calcular as distâncias entre todos os pares de pontos, dos quais existem $\frac{(n-1)}{2}$ e então escolher o par

com a menor distância. Este algoritmo de força bruta leva tempo $O(n^2)$, ou seja, seu tempo de execução é proporcional ao quadrado do número de pontos. Um resultado clássico em geometria computacional foi a formulação de um algoritmo que leva $O(n \log n)$. Algoritmos randomizados que levam $O(n)$ tempo esperado, bem como um algoritmo determinístico que leva $O(n \log \log n)$ tempo, também foram descobertos.

-

Problema estático

Nos problemas desta categoria, alguma entrada é fornecida e a saída correspondente precisa ser construída ou encontrada. Podem-se citar alguns problemas fundamentais desta categoria:

- envólucro convexo: Dado um conjunto de pontos, encontrar o menor poliedro/polígono convexo contendo todos os pontos;
- Intersecção de segmentos de reta: Encontrar as interseções entre um dado conjunto de segmentos de reta;
- Programação linear;
- Par de pontos mais próximos: Dado um conjunto de pontos, encontre os dois com a menor distância um do outro;
- Par de pontos mais distantes;
- Caminho mais curto euclidiano: Conecta dois pontos em um espaço euclidiano (com obstáculos poliédricos) por um caminho mais curto;
- Triangulação de polígonos: Dado um polígono, particione seu interior em triângulos;
- Geração de malhas;
- Operações booleanas em polígonos;
- dentro outros.

Quanto à complexidade computacional para esta classe de problemas é estimada pelo tempo e espaço necessários para resolver uma determinada instância do problema.

Apêndice C

Comparação entre o Formalismo QUBO e MaxCut, Utilizando Método Analítico

C.1 Conversão do Formalismo QUBO em MaxCut

Seja uma função pseudo-booleana, isto é, que tem a forma seguinte

$$f : \mathbb{B}^n \rightarrow \mathbb{R} \quad (\text{C.1})$$

em que $\mathbb{B} = \{0, 1\}$ é um domínio booleano e $n \in \mathbb{Z}^+$ denominado aridade¹ da função.

- *Definição de uma Função Quadrática Pseudo-Booleana*

Seja a função

$$f(x) = x^T Q x + c^T x \quad (\text{C.2})$$

em que $x \in \{0, 1\}$, $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz triangular superior e $c \in \mathbb{R}^n$ é um vetor coluna, como $x_i^2 = x_i$, pode-se supor que a diagonal de Q é nula. O problema consiste em encontrar o mínimo de f .

- *Abordagem de Resolução do Problema*

Consiste em reduzir este problema a um problema no formalismo *MaxCut* em ato contínuo usar uma descrição parcial do corte do politopo corte para abordar o problema com técnicas de programação linear.

¹Refere-se ao número de argumentos que uma função ou operação aceita, exemplo se uma função recebe dois argumentos tem aridade 2.

Definição C.1.1 (Corte). *Seja um grafo $G = (V, E)$ e $U \subseteq V$ e o conjunto $\delta(U) = \{ij \in E \mid i \in U, j \in V \setminus U\}$.*

Definição C.1.2 (Peso do Corte). *Dada uma função peso*

$$w : E \rightarrow \mathbb{R} \quad (\text{C.3})$$

O peso de um corte $\delta(U)$ é $w(\delta(U)) = \sum \{w_{ij} \mid ij \in \delta(U)\}$.

Consiste o problema no formalismo *MaxCut* em encontrar um corte $\delta(U)$, tal que $w(\delta(U))$ seja o maior possível.

Definição C.1.3 (Arestas). *Seja $U \subseteq V$, definir-se-á as arestas do grafo como sendo $E(U) := \{ij \in E \mid i, j \in U\}$*

- *Relação de Equivalência entre Programação Quadrática e o Formalismo MaxCut*

Dar-se-á início a este tópico com um lema que estabelece uma conexão encriptada entre dois formalismos, *a priori* oculta. Serão utilizadas proposições e teoremas auxiliares para a demonstração do Lema (C.1.1), como seguem:

Teorema C.1.1. *O isomorfismo é uma relação de equivalência, [205].*

Prova. Seja um espaço vetorial $I_v : V \rightarrow V$, desta forma, $V \stackrel{iso}{\cong} V$. Se $T : V \rightarrow W$ é um isomorfismo, ou seja, $V \stackrel{iso}{\cong} W \leftrightarrow W \stackrel{iso}{\cong} V$. Se $T : V \rightarrow W$ e $S : W \rightarrow Z$, são isomorfismos, então, $S \circ T : V \rightarrow Z$, é um isomorfismo, ou seja, $V \stackrel{iso}{\cong} W$ e $W \stackrel{iso}{\cong} Z \Rightarrow V \stackrel{iso}{\cong} Z$.

Logo o isomorfismo é uma relação de equivalência. □

Proposição C.1.1. *Todo grupo G de ordem $|G| = 2$ é isomorfo ao grupo $\mathbb{Z}_2$.*

Prova. Seja $S_2 = \langle \sigma_1, \sigma_2 \rangle$, em que $\sigma_1 = e_{S_2}$ e $\sigma_2 = (1, 2)$. Assim, tem-se a tabela a seguir, (vide observação (C.1.1)).

S_2^*	σ_1	σ_2
$\sigma_1 = e_{S_2} = (1)(2)$	σ_2	σ_1
$\sigma_2 = (1, 2)$	σ_1	σ_2

Construindo-se a tabela para para $\mathbb{Z}_2$ pode-se então se estabelecer uma tabela como em S_2 :

$\mathbb{Z}_2^*$	0	1
$e_{\mathbb{Z}_2} = 0$	0	1
1	1	0

A partir de uma análise judiciosa entre as duas tabelas, pode-se concluir que sempre que σ_1 desempenha uma função como identidade de S_2 , sendo que analogamente, 0 faz o mesmo em relação a $\mathbb{Z}_2$, sendo ambos finitos e portanto, existe uma função de bijeção natural entre ambos. De fato:

$$S_2 \stackrel{iso}{\cong} \mathbb{N}_2 \stackrel{iso}{\cong} \mathbb{Z}_2 \quad (\text{C.4})$$

□

Lema C.1.1. *Há uma equivalência entre a otimização quadrática 0 – 1, O formalismo QUBO e o formalismo MaxCut.*

Prova. ($\implies$): Seja uma função f , que pode ser escrita da forma seguinte

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n q_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^n c_i x_i \quad (\text{C.5})$$

A equivalência entre a otimização quadrática 0 – 1 e o formalismo *MaxCut* foi descrita na literatura. Para fins de completude, irá se apresentar a prova que segue. Definindo-se

Pode-se então consoante a [178, 206], transformar variáveis binárias $x_i \in \{0, 1\}$ para variáveis de spin $s_i \in \{-1, 1\}$ utilizando:

$$s_i = 2x_i - 1 \iff x_i = \frac{s_i + 1}{2} \quad (\text{C.6})$$

- *Análise da Expressão (C.6)*

- *Isomorfismo do Grupo $\mathbb{Z}_2$*

Observação C.1.1. *Analizando-se a expressão (C.6), têm-se que considerar o fato que tanto s_i e x_i são o grupo $\mathbb{Z}_2$, [207], explicitamente, pode ser descrito como um grupo com dois elementos, e e x tais que $ex = xe = x$ e $e^2 = x^2 = e$, sendo que este é também um espaço vetorial, (vide Proposição (C.1.1)).*

Observação C.1.2. *No caso em tela, ambos formalismos podem ser representados pelo grupo $\mathbb{Z}_2$.*

De acordo com a Observação (C.1.1), é um espaço vetorial, portanto, pode-se aplicar a este caso o seguinte Teorema que segue infra descrito: Com a prova do Teorema (C.1.1), resta concluir a Prova do Lema (C.1.1), cuja relação de equivalência é egressa de um isomorfismo de grupos e além disso, trata-se de uma relação de equivalência. Continuando e uma vez já provada a equivalência

entre a otimização quadrática 0 – 1 e o Formalismo *MaxCut* para fins de completude, pode-se escrever

$$\begin{aligned}
f(x(s)) &= \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{4} q_{ij} s_i s_j + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{4} q_{ij} s_i + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{4} q_{ij} s_j \\
&+ \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} c_i s_i + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{4} q_{ij} + \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} c_i s_i \\
&= \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{4} q_{ij} s_i s_j + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{4} q_{ij} s_i + \sum_{i=1}^{n-1} + \sum_{i=1}^n \left[\frac{1}{4} \left(\sum_{j=1}^{n-1} q_{ij} + \sum_{j=i+1}^n q_{ij} \right) + \frac{1}{2} c_i \right] s_i + C_1
\end{aligned} \tag{C.7}$$

• **Introduzindo o Nó Virtual s_0**

Em que, $s_i \in \{-1, +1\}$ e $C_i = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{4} q_{ij} + \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} c_i$, para a consecução do objetivo no formalismo *MaxCut*, adiciona-se uma variável auxiliar $s_0 \in \{-1, +1\}$:

$$\begin{aligned}
w_{0j} &= \frac{1}{4} \left(\sum_{j=1}^{i-1} q_{ij} + \sum_{j=i+1}^n q_{ij} \right) + \frac{1}{2} c_i, \quad 1 \leq j \leq n \\
w_{ij} &= \frac{1}{4} q_{ij}, \quad 1 \leq i < j \leq n
\end{aligned}$$

obtém-se $g(s) = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n w_{ij} s_i s_j + C_1$, como $g(s) = g(-s)$, (trata-se de uma função par, isto significa que o valor assumido pela função nos pontos s e $-s$ são iguais. Desta forma, pode-se afirmar que a função assume valores iguais para valores de s simétricos), assume-se $s_o = +1$ e $0 \in V^+$, sem perda da generalidade. O problema em tela é, então, minimizar g , [178] Defina-se o grafo $G = (V, E)$ com conjunto de nós $V = \{0, 1, 2, \dots, n\}$ e conjunto de arestas $E = \{ij \mid 1 \leq i < j \leq n\}$ e tome w_{ij} como o peso da aresta $ij \in E$. Cada atribuição de valores $+1$ e -1 às variáveis s_i corresponde a uma partição de V em $V^+ = \{i \in V \mid s_i = +1\}$ e $V^- = \{i \in V \mid s_i = -1\}$, desta forma, ignorando-se a constante C_1 , pode-se então escrever o formalismo como segue infra descrito, [178]

$$\min \left\{ \sum_{ij \in E(V^+)} w_{ij} + \sum_{ij \in E(V^+)} w_{ij} - \sum_{ij \in \delta(V^+)} w_{ij} \right\} \tag{C.8}$$

Também podendo ser escrito como, [178]

$$\min \left\{ -2 \cdot \sum_{ij \in \delta(V^+)} w_{ij} + C_2 \right\} \tag{C.9}$$

Em que (V^+, V^-) , sendo $W \subseteq V$ é uma partição de V e $C_2 = \sum_{ij \in E} w_{ij}$, desta forma, minimizar $f(x)$ é equivalente a maximizar o valor de corte $c(\delta(W))$. Finalmente, recuperamos as variáveis *QUBO* originais da partição *MaxCut* via *bump function*, (sendo um corte em G com valor z), [178]:

$$x_i = \begin{cases} 0, & \text{se } i \in V^- \\ 1, & \text{se } i \in V^+ \end{cases} \quad (\text{C.10})$$

Então, é uma solução do problema quadrático 0 – 1 com valor $-2z + C_1 + C_2$

($\Leftarrow$): A Prova é obvia pela questão da relação de equivalência, [178].

□

O objetivo aqui é descrever um problema envolvendo 3 cidades arbitrárias, para se verificar o resultado obtido no Lema (C.1.1).

- *Codificação do Problema*

Seja um conjunto de 3 cidades, pode-se modelar sua conexão como um grafo completo com 3 vértices e 3 arestas. As variáveis binárias x_{ij} representam a ativação ou não de cada aresta (i, j) no circuito do caixeiro viajante, seja a *bump function*:

$$x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se a aresta } (i, j) \text{ estiver presente no ciclo} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

O número total de arestas em um grafo completo de 3 vértices é dado por:

$$V(3) = \frac{3(3-1)}{2} = 3.$$

Portanto, precisa-se de 3 qubits, cada um associado a uma das respectivas arestas possíveis.

C.1.0.1 Restrições do Problema, Formulação Geométrica

- Representação Geométrica

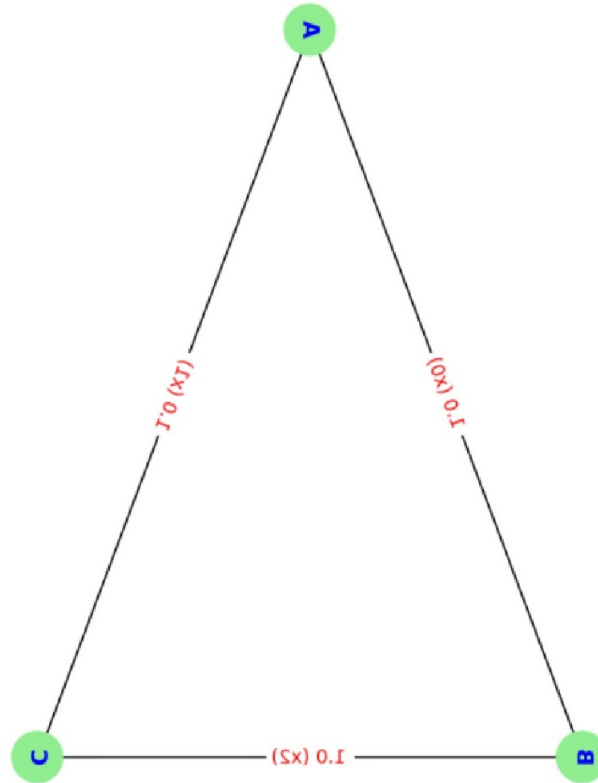


Figura C.1: Descrição Geométrica de um Circuito com 3 nós, representados geometricamente por um grafo K_3 , com cada aresta com seu peso respectivo, no caso em tela 10, egresso do emulador Qiskit. Fonte: Autor.

Como visto, para garantir que a solução gerada represente um ciclo válido, deve se impor as seguintes restrições:

- **Restrição de ciclo:** O ciclo do caixeiro viajante deve percorrer exatamente 4 arestas, garantindo que todas as cidades sejam visitadas uma única vez:

$$x_{01} + x_{02} + x_{12} = 3. \quad (C.11)$$

- **Restrição de conectividade:** Cada cidade deve estar conectada a exatamente duas outras

idades, assegurando que o percurso forme um ciclo válido:

$$x_{01} + x_{02} = 2, \quad (C.12)$$

$$x_{01} + x_{12} = 2, \quad (C.13)$$

$$x_{02} + x_{12} = 2. \quad (C.14)$$

Dessa forma, evitamos subciclos e garantimos que a solução represente um trajeto único percorrendo todas as cidades.

- **Simplificação da Notação**

- Para se simplificar os cálculos utilizar-se-á doravante a notação, x_1, x_2, x_3 .

- **Escrevendo como Função de x**

Seja

$$f(x) = x_0 + x_1 + x_2 + 10[(x_0 + x_1 - 2)^2 + (x_0 + x_2 - 2)^2 + (x_1 + x_2 - 2)^2] + 10(x_0 + x_1 + x_2 - 3)^2 \quad (C.15)$$

Partindo-se de (C.15), tem-se que:

$$f(x) = \underbrace{\sum_{i < j} q_{ij} x_i x_j}_{\text{Matriz Triangular Superior}} + \underbrace{\sum_i c_i x_i}_{\text{Vetor}} + \underbrace{\sum_i d_i x_i^2}_{\text{Matriz Diagonal}} + cte \quad (C.16)$$

Quanto à equação (C.16), tem-se que o primeira termo faz menção explícita a matriz diagonal, descrita por [20], em suas pesquisas sobre o formalismo QUBO, o outro faz a descrição de um vetor, mas, o penúltimo termo, carrega muita informação, pois apresenta um caráter tensorial².

²Eleita uma base local, o tensor métrico figura como uma matriz, denotada convencionalmente G , a notação

$$g_{ij} \text{ é utilizada como sendo } g = \sum_{i,j=1}^n g_{ij} dq^i \otimes dq^j \quad G = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & \dots & g_{1n} \\ g_{21} & g_{22} & \dots & g_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ g_{n1} & g_{n2} & \dots & g_{nn} \end{pmatrix} \text{ ou de forma mais usual,}$$

utilizando-se a convenção da soma de Einstein $g = g_{ij} dq^i \otimes dq^j$. Pode-se ainda descrever a métrica como sendo a secção de um fibrado, pela propriedade universal do produto tensorial, qualquer mapa bilinear $g : TM \times_M TM \rightarrow \mathbb{R}$, dá origem naturalmente a uma secção $g_\otimes$ do dual do fibrado produto tensorial de TM consigo mesmo, ou seja, $g_\otimes \in \Gamma((TM \otimes TM)^*)$, a secção $g_\otimes$ é definida em elementos de $TM \otimes TM$ por $g_\otimes(v \otimes w) = g(v, w)$ e é definida em elementos arbitrários de $TM \otimes TM$ estendendo-se linearmente para combinações lineares de elementos simples. A forma bilinear original g é simétrica se e somente se $g_\otimes \circ \tau = g_\otimes$, em que $\tau : TM \otimes TM \xrightarrow{\cong} TM \otimes TM$, trata-se do mapa trança. Como $M < \infty$, (é de dimensão finita), há um isomorfismo natural $(TM \otimes TM)^* \cong T^*M \otimes T^*M$, de modo que $g_\otimes$ é considerado também como uma secção do fibrado $T^*M \otimes T^*M$ do fibrado cotangente T^*M consigo mesmo. Como g é simétrico como uma aplicação bilinear, segue-se que $g_\otimes$ é um tensor simétrico.

- **Cálculo das Restrições**

- *Restrições de Conexão*

Como se trata de um espaço vetorial normado, então, pode-se considerar as restrições contidas nas equações (C.12), (C.13) e (C.14), a partir da expressão (C.15), ter-se-á:³

$$(x_0 + x_1 - 2)^2 = (x_0 + x_1 - 2)(x_0 + x_1 - 2) \quad (\text{C.17})$$

Na equação (C.17), elevou-se a expressão ao quadrado para eliminar-se a norma, desenvolvendo o produto, tem-se que:

$$\begin{aligned} (x_0 + x_1 - 2)(x_0 + x_1 - 2) &= x_0^2 + x_0x_1 - 2x_0 + \\ &\quad x_1x_0 + x_1^2 - 2x_1 + \\ &\quad - 2x_0 - 2x_1 + 4 = \\ x_0^2 + x_1^2 &= 2x_0x_1 - 4x_0 - 4x_1 + 4 \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

$$(x_0 + x_2 - 2)^2 = (x_0 + x_2 - 2)(x_0 + x_2 - 2) \quad (\text{C.19})$$

$$\begin{aligned} (x_0 + x_2 - 2)(x_0 + x_2 - 2) &= x_0^2 + x_0x_2 - 2x_0 + \\ &\quad x_2x_0 + x_2^2 - 2x_2 + \\ &\quad - 2x_0 - 2x_2 + 4 = \\ x_0^2 + x_2^2 + 2x_0x_2 &- 4x_0 - 4x_2 + 4 \end{aligned} \quad (\text{C.20})$$

$$(x_1 + x_2 - 2)^2 = (x_1 + x_2 - 2)(x_1 + x_2 - 2) \quad (\text{C.21})$$

³Se $(V, \|\cdot\|)$, é um espaço vetorial normado, a norma $\|\cdot\|$ induz uma métrica, uma noção de distância e portanto, uma topologia sobre V . Trata-se uma norma como sendo uma generalização da noção intuitiva de *comprimento* no mundo físico. Se V é um espaço vetorial sobre K , em que K é um corpo igual a $\mathbb{R}$ ou a $\mathbb{C}$, então uma norma em V é então uma norma em V é um mapa $V \rightarrow \mathbb{R}$, denotada por $\|\cdot\|$, satisfazendo os quatro axiomas a seguir: $x \in V$, $\|x\| \geq 0$; Ser definida positiva, ou seja, para todo $x \in V$, $\|x\| = 0$ se e somente se x for o vetor nulo; Homogeneidade absoluta: para todo $\lambda \in K$ e $x \in V$, $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$; Desigualdade triangular para todo $x \in V$ e $y \in V$, $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$, uma norma induz uma distância, denominada métrica induzida, o que transforma qualquer espaço vetorial normado em um espaço métrico, tendo-se então uma topologia induzida pela métrica, portanto, um espaço vetorial topológico.

$$\begin{aligned}
(x_1 + x_2 - 2)(x_1 + x_2 - 2) &= x_1^2 + x_1x_2 - 2x_1 + \\
& x_1^2x_2^2 + x_1x_2 - 2x_2 + \\
& - 2x_1 - 2x_2 + 4 = \\
& x_1^2 + x_2^2 + 2x_1x_2 - 4x_1 - 4x_2
\end{aligned} \tag{C.22}$$

• *Restrição de Ciclo*

$$(x_0 + x_1 + x_2 - 3)^2 = (x_0 + x_1 + x_2 - 3)(x_0 + x_1 + x_2 - 3) \tag{C.23}$$

$$\begin{aligned}
(x_0 + x_1 + x_2 - 3)(x_0 + x_1 + x_2 - 3) &= x_0^2 + x_0x_1 + x_0x_2 - 3x_0 \\
& x_1x_0 + x_1^2 + x_1x_2 - 3x_1 + \\
& x_2x_0 + x_2x_1 + x_2^2 - 3x_2 + \\
& - 3x_0 - 3x_1 - 3x_2 + 9 = \\
& x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + 2x_0x_1 + 2x_0x_2 + 2x_1x_2 - 6x_0 - 6x_1 - 6x_2
\end{aligned} \tag{C.24}$$

Somando-se as equações: (C.18)+(C.20)+(C.22)+(C.24), ter-se-á como resultado:

$$\begin{aligned}
& 3x_0^2 + 3x_1^2 + 3x_2^2 + \\
& 4x_0x_1 + 4x_0x_2 + 4x_1x_2 \\
& - 14x_0 - 14x_1 - 14x_2 + 21
\end{aligned} \tag{C.25}$$

Observação C.1.3. *Note-se que até agora não foi utilizado o peso, que neste caso tem o valor 10, introduzido na equação (C.25).*

Observação C.1.4. *Deve-se observar que na equação (C.25), é possível fazer-se a permutação seguinte: $x_ix_j = x_jx_i$, observando-se que $\forall i, j \in \mathbb{Z}^+$, com $i \neq j$.*

• **Peso das Arestas**

Equação (C.25) $\times 10 =$ (C.26):

$$\begin{aligned}
& 30x_0^2 + 30x_1^2 + 30x_2^2 + \\
& 40x_0x_1 + 40x_0x_2 + 40x_1x_2 \\
& - 140x_0 - 140x_1 - 140x_2 + 210
\end{aligned} \tag{C.26}$$

Realizando-se as fatorações em (C.26), obtêm-se:

$$\begin{aligned}
& 30(x_0^2 + x_1^2 + x_2^2) + \\
& 40(x_0x_1 + x_0x_2 + x_1x_2) \\
& - 140(x_0 + x_1 + x_2) + 210
\end{aligned} \tag{C.27}$$

• O Formalismo QUBO e os Resultados Obtidos

Sistematizando-se os resultados obtidos na equação (C.26), resultado egresso da equação (C.15) e levando-se em conta a equação (C.16), tem-se que:

- $q_{ij} = 40$;
- $c_i = -109$, isto por que pode-se efetuar a soma, $c_i = -139, d_i = 30$, sendo então, $-139 + 30 = -109$, portanto, o resultado;
- a constante, denotada por $cte = 210$.

Fazendo-se as devidas substituições em (C.16), ter-se-á:

$$f(\underbrace{x_0, x_1, x_2}_x) = 40(x_0x_1 + x_0x_2 + x_1x_2) - 109(x_0 + x_1 + x_2) + 210 \tag{C.28}$$

• O Formalismo *MaxCut*

Um problema QUBO em n variáveis, definido pelos coeficientes q_{ij} , com $j \in \{1, \dots, n\}$, pode ser transformado no formalismo *MaxCut* equivalente em $(n+1)$ -vértices. Para tanto, considere-se o grafo completo K_{n+1} com vértices, $V = \{0, \dots, n\}$, no caso em tela, tem-se que $n = (3+1)$, a situação está descrita geometricamente na figura (C.2)⁴.

⁴Na figura (C.2), embora figure "AUX", optou-se pelo uso da denominação Nó Virtual, sem perda de generalidade)

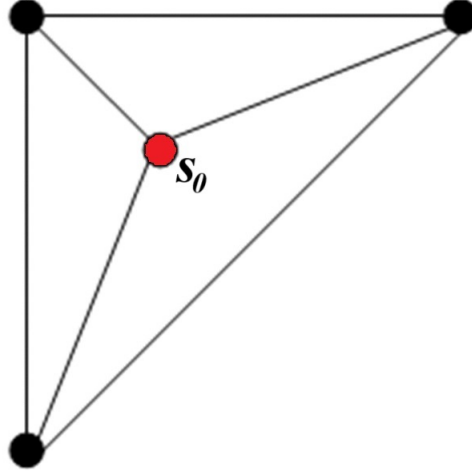


Figura C.2: Descrição Geométrica de um grafo com descrição geométrica de um grafo com 4 nós $K_{(3+1)}$, sendo um nó virtual s_0 , com cada aresta com seu peso respectivo, aqui denotado por AUX , egresso do emulador Qiskit. Trata-se de um grafo planar. Fonte: Autor.

Naturalmente, os grafos K_3 estão mergulhados⁵ no plano $\mathbb{R}^2$ e portanto, a partir desta configuração e da inserção de um nó virtual tem-se que, ter-se-á um grafo $K_{(3+1)}$, uma vez que de forma geral, um formalismo QUBO com n -variáveis, reduz-se ao formalismo *MaxCut* com $(n + 1)$ -nós. Deve-se observar que o grafo da figura (C.2), é um grafo planar, como segue:

- **O Formalismo *MaxCut* para $(3 + 1)$ -nós.**

Para iniciar deve-se voltar ao Lema (C.1.1), pode-se obter deste lema, as seguintes importantes conclusões, as correspondências entre as variáveis, devido à relação de equivalência:

- **A Equação dos Pesos das Arestas**

Seja a equação:

$$w_{ij} = \frac{1}{4}q_{ij} \quad (\text{C.29})$$

Fazendo uso da equação (C.29), ter-se-á: Sendo o coeficiente 40, egresso do formalismo QUBO, mais particularmente, tratam-se dos coeficientes que acompanham as variáveis que estão dispostas na seguinte forma $q_{ij}x_i x_j$, já poder-se-á realizar as substituições, então:

$$w_{ij} = \frac{40}{4} = 10 \quad (\text{C.30})$$

⁵Intuitivamente um mergulho $f : X \rightarrow Y$ leva a tratar X com um subespaço de Y . Todo mergulho é injetor e contínuo.

- **Arestas entre o Nó Virtual s_0 e s_j**

Para realizar-se o cálculo dos pesos das arestas que conectam este nó virtual, considerando-se que $j \in \{1, 2, 3\}$, é realizado pela equação que segue abaixo, [208]:

$$w_{0j} = \frac{1}{4} \left(\sum_{l < j} q_{lj} + \sum_{l > j} q_{jl} \right) + \frac{1}{2} c_j \quad (\text{C.31})$$

Observando-se a equação (C.31), nota-se que o número inteiro zero está fixado no infra-índice da variável w , que faz menção ao peso das arestas, quanto ao somatório, tem-se que os coeficientes, q_{lj} e q_{jl} , são simétricos⁶ portanto, permutando-se os infra-índices nas condições dadas, $l < j$ e $l > j$, tornará os resultados idênticos, portanto, fazendo-se a substituição dos valores dos coeficientes, neste caso o valor de c_j é egresso do tópico (C.1.0.1), ter-se-á então que se fazer as devidas permutas dos valores das variáveis na equação (C.31):

$$w_{0j} = \frac{1}{4}(40 + 40) + \frac{1}{2}(-109) = 20 - 54,5 = -34,5 \quad (\text{C.32})$$

- **Cálculo da Constante**

Introduzindo-se a equação

$$C_i = \frac{1}{4} \sum_{i < j} q_{ij} + \frac{1}{2} \sum_i c_i \quad (\text{C.33})$$

A partir da equação (C.1.0.1), tem-se que serão 3 resultados possíveis, C_1, C_2, C_3 , portanto, não constitui óbice em verificar o resultado final que segue infradescrito

$$C_t = \frac{1}{4}(40 + 40 + 40) + 3\left(\frac{1}{2}(-109)\right) = -133,5 \quad (\text{C.34})$$

Basta agora inserir os resultados na função $g(s)$, que será doravante escrita como:

$$g(\underbrace{s_0, s_1, s_2, s_3}_s) = 10(s_1 s_2 + s_1 s_3 + s_2 s_3) - 34,5(s_0 s_1 + s_0 s_2 + s_0 s_3) - 133,5 \quad (\text{C.35})$$

Finalizada esta etapa pode-se agora introduzir uma tabela que consiga comparar os resultados,

⁶Relativamente a questão da simetria e que está se discorrendo implicitamente sobre um sistema matricial, então, $Q = Q^t$, portanto, considerando-se uma entrada desta matriz, $[q_{ij}] = [q_{ji}]$ para $\forall 1 \leq j \leq n$ sendo $[q_{ij}]$ uma entrada na posição (i, j) , sendo a i -ésima linha e j -ésima coluna na matriz Q e q_{ji} trata-se de uma entrada na posição (j, i) , sendo j -ésima linha e i -ésima coluna na matriz $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

evidenciando sua complementabilidade, ou seja, neste quesito, trata-se de averiguar que o formalismo QUBO objetiva um processo de minimização, sendo que o MaxCut, busca a reciprocidade.

Como leciona [178], além da descrição dada no tópico (C.1), egressa deste artigo, os resultados supradescritos são os esperados, uma vez que desta forma, pode-se concluir que estão encriptados nas x (bitstrings), são descriptados pelos formalismos QUBO e MaxCut, devem ser entendidos de forma intrínseca como sendo, respectivamente, o menor valor em módulo dentre os valores apresentados na tabela, mais especificamente da quarta coluna e o maior valor em módulo dentre os valores que constam na quinta coluna da tabela (8.1). Eis a equivalência dentre os formalismos.

Apêndice D

Estrutura do VQE e Formalismo de Rede Tensorial

O tipo e a ordem das portas usados para todos os circuitos neste trabalho são fornecidos nas Figura (D.1) e em sua **Alínea (c)** e a profundidade do circuito é discutida em referência a cada simulação numérica. Quando o mesmo *Ansatz* de circuito é usado, nosso algoritmo supera o *VQE* em uma variedade de tarefas de otimização, exigindo menos qubits. Não obstante, aspectos do algoritmo possam facilitar a simulação classicamente, deve-se enfatizar que o algoritmo é um protocolo quântico classicamente intratável para problemas de grande escala, particularmente.

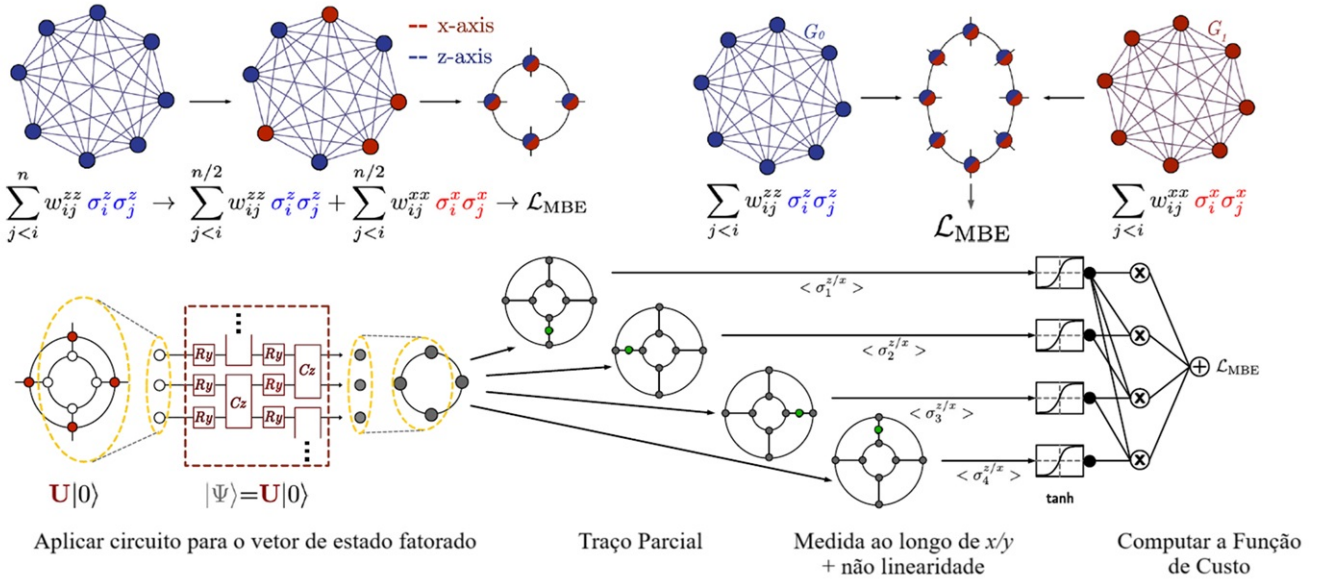


Figura D.1: *(Da esquerda para a direita)* **(Alínea a):** Codificação em múltiplas bases de um grafo de n vértices na cor azul representa o formalismo de Ising. **(Alíneas b):** Codificação (MBE) com dois grafos distintos de n qubits. **(Alínea c):** visão da abordagem da MBE egressa da lição de Patti, [49], para um grafo de n vértices. Fonte: [49]

- **Observações sobre a Figura (D.1)**

- Relativamente a **Alínea a:**, deve-se reatribuir $n/2$ vértices dos operadores σ_z , representado na cor azul, para σ_x , na cor vermelha, permitindo mapear o grafo para apenas $n/2$ qubits, que estão representados em um anel tensorial nas cores azul/vermelho, conectado-se ao vizinho mais próximo. Desta forma obtém-se o formalismo MaxCut via otimização desse estado por medições de um único qubit. Os núcleos tensores no formalismo de anel tensorial compartilham apenas ligações com núcleos vizinhos, resolvem efetivamente grafos MaxCut com distribuições de arestas, [49].
- Quanto a **Alínea b:**, cada um é mapeado para o formalismo de Ising clássico, com G_0 representado na cor azul, codificado ao longo da base z , como é usual e G_1 na cor vermelha utilizando a base x , resultando em um estado quântico de n qubits, representados em azul/-vermelho. Essa codificação é análoga à MBE com um único grafo, exceto que as bases x e z , codificam independentemente dois grafos separados e portanto, não são necessários termos cruzados entre as bases z e x , [49].
- No que tange a **Alínea c**, para se encontrar $\text{MaxCut}(G)$ variacionalmente, o estado de en-

trada nulo supra $(n/2)$ -qubits, no caso em tela 4 qubits, $|0\rangle$ (um MPS) é desenvolvido sob um circuito quântico parametrizado U (um MPO), produzindo um estado de saída $|\psi\rangle$. Sendo U codifica um circuito de profundidade L , em que $L = 4$; representada pela caixa vermelha com linhas pontilhadas. Após o traço parcial, cada qubit é medido independentemente nas bases de Pauli x e z e uma função de ativação não linear¹, no caso $\tanh$ ² é aplicada. A função $\mathcal{L}_{MBE}$ (vide equação (D.17)) é minimizada via gradiente descendente. Os valores de spin de Pauli x e z da função de onda resultante $|\psi\rangle$ são então arredondados para ± 1 , (vide equação D.17). Esse arredondamento faz com que estados próximos ao mínimo global de $\mathcal{L}_{MBE}$ correspondam a $|\psi\rangle = |\psi_g\rangle$, a solução básica do MaxCut, [49].

D.1 Características do Algoritmo MBE

- A codificação deste algoritmo prevê o uso de múltiplas bases, trata-se de um algoritmo de otimização quântica que introduz restrições adicionais, reduzindo sua suscetibilidade a mínimos locais na paisagem de treinamento. Provou-se o algoritmo a partir do formalismo MaxCut e constatou-se empiricamente que a MBE supera o VQE em 5–7% ao usar o mesmo circuito *Ansatz*, [49];
- Ao dobrar a quantidade de recursos de otimização codificados em um único qubit, os MBEs reduzem pela metade o número de qubits necessários para uma determinada tarefa de otimização, caracterizando-se desta forma, duas grandezas inversamente proporcionais. Trata-se de um manancial valioso para um campo em desenvolvimento que investiu várias décadas

¹**Custo computacional:** É importante lembrar que operações matemáticas lineares não têm um alto custo computacional, portanto, uma função de ativação deve aumentar esse custo apenas na medida em que forneça a característica desejada. **Propriedades: Continuamente diferenciável:** a propriedade é desejável para habilitar métodos de otimização baseados em gradiente. A função de ativação de degrau binário (Trata-se de uma função de ativação baseada em limiar, o que significa que, após um determinado limiar, o neurônio é ativado e abaixo desse limiar, o neurônio é desativado. Deve-se salientar que esse conceito é egresso de redes neurais. Se o valor for inferior a 0, o valor se torna 0. Esta função de ativação não é adequada em casos de não linearidade). Além disso, como a rede não é diferenciável, o treinamento baseado em gradiente não é possível. não é diferenciável em 0 e diferenciável para 0 para todos os outros valores, portanto, métodos baseados em gradiente não podem progredir com esta função. **Sem Produção de Platôs:** Platôs são regiões do universo de resultados que tendem a ser constantes. Quando uma função possui regiões constantes, as derivadas nessas regiões tendem a zero, o que causa o problema chamado Gradiente de Fuga (ocorrem quando o gradiente é muito pequeno. À medida que retrocede-se durante a retropropagação, o gradiente continua diminuindo, fazendo com que as camadas anteriores da rede aprendam mais lentamente do que as camadas posteriores, ou seja, o gradiente tende a zero e a rede não consegue mais convergir (ete conceito é egresso da aprendizagem profunda).

²Em geral é vantajoso o uso desta função, pois pode ajudar o algoritmo de aprendizado a convergir mais rapidamente. Como a saída de $\tanh$, uma vez que varia entre $[-1, +1]$, portanto, tem gradientes mais pronunciados que a função sigmoide, que possui a seguinte caracterização $f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$, possui em sua representação geométrica a forma de um "S" latino.

para atingir registradores de aproximadamente 50 qubits e em que limitações adicionais de coerência surgem em escala, [209];

- Ao combinar o algoritmo com funções de ativação não lineares, utilizar-se-á os circuitos quânticos relativamente superficiais para resolver problemas de otimização MaxCut para vários grafos, incluindo grafos com distribuições de arestas aleatórias. Como as heurísticas quânticas variacionais tendem a ter melhor desempenho com o aumento da expressividade do circuito, como por exemplo, profundidade do circuito, sendo estas relativamente baixas no formalismo MBEs podem indicar que o uso de não linearidades clássicas, cujo uso serve para aumentar a expressividade de redes clássicas, é uma compensação entre a expressividade quântica e a clássica. Além disso, a amostragem de aproximadamente 5 inicializações de nossos experimentos MBE em circuitos rasos (profundidade $L = 7$ para grafos de 100 vértices, de modo que L seja aproximadamente logarítmico³ no número de vértices), leva à convergência de corte ótima com probabilidade próxima à unidade. Este procedimento de circuito raso e multidisparos é mais coerente e eficiente em termos de tempo do que a convergência determinística com circuitos profundos, que requerem um número exponencial de parâmetros, [49].

- **Contribuição para Simulação em Larga Escala, Ferramentas Matemáticas**

Embora, [49] se valha de softwares para tratar redes tensoriais, dar-se-á uso tão somente a priori do QISKIT, para simular algoritmos quânticos práticos. Especificamente:

- a capacidade do algoritmo de operar com circuitos relativamente rasos dá permissividade de usar redes tensoriais com postos menores. Como a classificação de uma estrutura tensorial determina a complexidade de tempo e memória de sua contração, pode-se simular implementações de alta precisão da MBE em escalas consideráveis.

- **Definição de Tensor**

Dar-se-á aqui uma definição via produto tensorial que foi escopo da subsecção (2.3.1):

Definição D.1.1 (Definição via produtos tensoriais de espaços vetoriais). *Dado um conjunto finito $V_1, \dots, V_n$ de espaços vetoriais sobre um corpo comum $\mathbb{F}$, pode-se formar seu produto tensorial $V_1 \otimes \dots \otimes V_n$, cujo elemento é denominado tensor. Um tensor em um espaço vetorial V é então definido como um vetor em um espaço vetorial da forma: $V \otimes \dots \otimes V \otimes V^* \otimes \dots \otimes V^*$, em que V^**

³Faz referência a um valor ou escala que é próximo ou que seja análogo a uma função logarítmica.

é o espaço dual de V . Se houver m cópias de V e n cópias de V^* , neste produto, diz-se que o tensor é do tipo (m, n) e contravariante de ordem m e covariante de ordem n e de ordem total $m + n$. Os tensores de ordem zero são apenas os escalares, que são elementos do corpo $\mathbb{F}$, aqueles de ordem contravariante 1 são os vetores em V e aqueles de ordem covariante 1 são as formas univariantes em V^* , por tal razão os elementos dos dois últimos espaços são frequentemente denominados de vetores contravariantes e covariantes, [205, 210, 211].

• Redes Tensoriais

Redes tensoriais são uma classe de funções de onda variacionais utilizadas no estudo de sistemas quânticos de múltiplos corpos e fluidos, [212–214]. Redes tensoriais estendem estados de produtos matriciais unidimensionais, [213], para dimensões mais altas, preservando algumas de suas propriedades matemáticas. A função de onda é codificada como uma contração tensorial de uma rede de tensores individuais, [212]. A estrutura dos tensores individuais pode impor simetrias globais à função de onda (como antissimetria sob troca de férmions), [212] ou restringir a função de onda a números quânticos específicos, como carga total, momento angular ou spin. Também é possível derivar limites estritos para grandezas como emaranhamento e comprimento de correlação usando a estrutura matemática da rede tensorial. Isso tornou as redes tensoriais úteis em estudos teóricos de informação quântica em sistemas de múltiplos corpos. Também se mostraram úteis em estudos variacionais de estados fundamentais, estados excitados, entre outras aplicações [214].

• Notação Diagramática

Em geral, um diagrama de rede tensorial, também denominado diagrama de Penrose, (trabalho seminal, que deu início a esta técnica), [214, 215], pode ser visto como um grafo em que os nós representam tensores individuais, enquanto as arestas representam a soma sobre um índice. Índices livres são representados como arestas (ou pernas), anexadas a um único vértice. Às vezes, a forma de um nó também tem um significado adicional. Por exemplo, trapézios podem ser usados para matrizes unitárias [216] ou tensores com comportamento semelhante. Dessa forma, trapézios invertidos seriam interpretados como conjugados complexos.

• Anéis Tensoriais

introduzidos em 1927, [217, 218], em um trabalho seminal, as decomposições tensoriais foram originalmente e têm uso em diversos campos, desde a computação científica até a análise de dados,

com uma aplicação inicial em um ramo da psicologia que têm conexões com a matemática aplicada, a psicometria, [219].

Com o advento da computação nas últimas décadas, tais decomposições tornaram-se ainda mais relevantes, pois contornam o problema da dimensionalidade ao alcançar complexidades operacionais por meio do escalonamento linear com a dimensão de entrada, em vez de exponencial. Dentre aplicações recentes podem-se citar em aprendizado de máquina, completção tensorial e análise numérica em altas dimensões. Considere-se o formato de anel tensorial (cujo acrônimo em inglês é TR) de um tensor, [218]

$$T \in \mathbb{R}^{n_1 \times \cdots \times n_d} \quad (D.1)$$

também conhecido como formato de cadeia tensorial na literatura matemática pregressa ou formato de estados de produto de matriz com limites periódicos na literatura de física, como por exemplo, [212, 220, 221].

O formato é dado por tensores da forma

$$T(i_1, \dots, i_d) = Tr(G_1(i_1) \cdot \dots \cdot G_d(i_d)) \quad (D.2)$$

Ou a equação (D.2), pode ser descrita na forma de índice, [218]

$$T(i_1, \dots, i_d) = \sum_{\alpha_0=1}^{r_0} \cdots \sum_{\alpha_{d-1}=1}^{r_{d-1}} G_1(\alpha_0, i_1, \alpha_1) \cdot \dots \cdot G_d(\alpha_{d-1}, i_d, \alpha_0) \quad (D.3)$$

Sendo que figuram em ambas expressões, (D.2) e (D.3), $G_k i_k$ que são matrizes, $dim(G_k i_k) = rk - 1 \times r_k$, para $\forall i_k$ com $i \leq i_k \leq n_k$, naturalmente, cada $G_k i_k$ pode ser visto como sendo um tensor de terceira ordem em

Definição D.1.2. *Seja*

$$\mathbb{R}^{r_{k-1} \times n_k \times r_k} \quad (D.4)$$

A expressão (D.4), é denominada um núcleo do tensor de representação na equação (D.2) e o vetor $(r_0, \dots, r_d)$, com $r_d = r_0$, denomina-se TR -rank da representação em (D.2), [218]. O formato TR pode ser visto como uma extensão natural do formato de trem tensorial (cujo acrônimo em inglês é TT , *Tensor Train*) em que se insiste que $r_0 = r_d = 1$.

Geralmente, sabe-se que formas de tensores baseados em grafos com ciclos no grafo associado

não são fechados (na topologia de Zariski⁴), [218], o que pode levar a preocupações sobre problemas de estabilidade numérica em analogia a uma configuração clássica. Além disso, foi recentemente demonstrado que, para o formato TR , os postos mínimos deste para um determinado tensor não precisam ser únicos, (nem mesmo até a permutação dos índices $(i_1, \dots, i_d)$), levando a dificuldades em seu cálculo, [218].

De um ponto de vista pragmático e prático, o uso desse formato em experimentos numéricos tem sido vistos como levando a postos mais baixos dos tensores centrais em comparação com o formato TT , resultando em maiores taxas de compressão e menores custos de armazenamento necessários para representar um determinado tensor. A literatura matemática, [222], portanto, tem visto um interesse renovado no formato TR nos últimos anos, com o objetivo de desenvolver o sucesso da teoria e das aplicações do formato TT e ao mesmo tempo, melhorar ainda mais as taxas de compressão dos tensores envolvidos, [218].

- *Representação Geométrica*

Objetivando-se simplificar a notação, denotar-se-á a decomposição TR por

$$T = \mathcal{R}\{Z_1, Z_2, \dots, Z_d\} \quad (\text{D.5})$$

Que segue abaixo em forma geométrica:

⁴Em essência, há uma relação entre a topologia de Zariski, os anéis tensoriais, (TR) e o formato de trem tensor (TT) que fornecem uma estrutura para o estudo da geometria e das propriedades de representações de dados em altas dimensões. Essa estrutura é crucial para o desenvolvimento de algoritmos eficientes para tarefas de decomposição, aproximação e otimização de tensores.

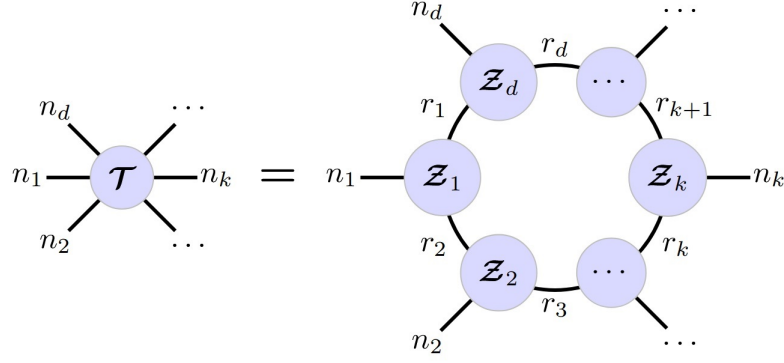


Figura D.2: Pode-se deduzir que a representação TR é um produto multilinear circular de uma sequência de tensores de terceira ordem, resultando no fato de que a sequência pode ser deslocada circularmente sem alterar essencialmente o resultado, o que corresponde a um deslocamento circular dos modos tensores. Como este modelo graficamente se parece com um anel e suas operações multilineares podem ser deslocadas circularmente, denominou-se naturalmente de decomposição em anel tensorial. Fonte: [223].

Objetivando-se encontrar o MaxCut de um dado grafo em um computador quântico, é conveniente minimizar o somatório equivalente, $\sum_{j < i} w_{ij} x_i x_j$, seja um grafo com n vértices x_i , isso reduz o problema a encontrar a função de onda de um sistema de n qubits $|\psi\rangle$ que minimiza o valor esperado da energia $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ do Hamiltoniano clássico do formalismo de Ising, com os operadores de Pauli, [49].

$$H = \sum_{j < i}^n w_{ij}^{zz} \sigma_i^z \sigma_j^z \quad (\text{D.6})$$

Como H contém apenas termos na base z , seus autovetores são clássicos, em outras palavras, estados de produto de emaranhamento nulo, tais que $|\psi_i\rangle = \otimes_s |s\rangle$, em que $|s\rangle \in \{|0\rangle, |1\rangle\}$. Aqui, denota-se o menor autovalor ou solução de *estado fundamental* como ψ_g , cujos qubits formam uma bijeção com o x_i ótimo de $MaxCut(G)$. Como a equação (D.6), possui simetria⁵ $\mathbb{Z}_2$, $|\psi_g\rangle$ é degenerado com o estado $X^{\otimes n} |\psi_g\rangle$.

A Figura (D.1) em sua **Alínea (b)**, descreve a estrutura VQE , [224], quanto à equação (8.3) é otimizada definindo a função custo $L = E$ e variando os parâmetros $\hat{\theta}$ de um circuito quântico com U unitário ($\hat{\theta}$), que atua no estado quântico de entrada,

⁵**Grupo $\mathbb{Z}_n$.** Este grupo descreve a simetria de uma figura plana invariante após uma rotação de $2\pi/n$ graus. O grupo não trivial mais simples é o grupo $\mathbb{Z}_2$, que consiste em dois elementos e, σ tais que $e\sigma = \sigma e = \sigma$, $\sigma^2 = \sigma\sigma = e$. De um ponto de vista físico, os autoestados de um hamiltoniano $\mathbb{Z}_2$ -simétrico são pares ou ímpares sob a operação de paridade. Isso denota que para um dado autoestado de energia $|\psi\rangle$, existe um autovalor n tal que $S|\psi\rangle = +|\psi\rangle$, par ou $S|\psi\rangle = -|\psi\rangle$ ímpar.

vide figura (D.1) **Alínea b**). Sem perda de generalidade, define-se o estado de entrada como o estado zero de n qubits $|\mathbf{0}\rangle = \otimes_n |0\rangle$, tal que

$$|\psi\rangle = U(\hat{\theta})|\mathbf{0}\rangle \quad (\text{D.7})$$

Decompõe-se esta matriz unitária U como sub-unitárias $U(\hat{\theta}) = \prod_k^\Lambda U_k(\hat{\theta}_k)$, em que se trata do subconjunto correspondente de $\hat{\theta}$ e $U_k(\hat{\theta}_k) = \prod_k^\Lambda \exp(-i\hat{\theta}_j W_j) M_k$, para operadores Hermitianos genéricos W_j e matrizes unitárias M_k . Destarte, o gradiente descrito em, [49, 225], denotar-se-á por

$$g_l(\hat{O}) = \frac{\partial \langle \hat{O} \rangle}{\partial \hat{\theta}_l} \quad (\text{D.8})$$

Para $\forall \theta_l \in \hat{\theta}$, será

$$g_l(\hat{O}) = i \langle \mathbf{0} | U_R^\dagger [W_l, U_L^\dagger \hat{O} U_L] U_R | \mathbf{0} \rangle \quad (\text{D.9})$$

em que U_L e U_R são as composições de U_k unitárias com $k \geq e$ e $k < 1$, respectivamente⁶.

Ao invés de utilizar-se circuitos de extensa conectividade, focou-se nos de anéis tensoriais unidimensionais, ($1D$) de n qubits, particularmente, anéis tensoriais possuem condições periódicas de contorno⁷, tais que o qubit $n - 1$ esteja conectado ao qubit 0, trata-se esta conectividade do vizinho mais próximo, o que torna o circuito passível tanto do ponto de vista de um hardware quântico a curto prazo, [49, 226] quanto de simulação via tensores decompostos, [49].

Na lição de Patti, [49], fora realizada essa simulação com *TENSORLY-QUANTUM*, cuja descrição encontra-se em, [227], que se trata de um pacote de software de domínio público, *TENSORLY-QUANTUM* que busca elevar a estrutura de tensores decompostos a fim de simular o aprendizado de máquina quântica da maneira mais eficiente e não aproximada possível.

Embora redes tensoriais baseadas em anéis tensoriais sejam tipicamente usadas para inferência aproximada e obtidas pela aplicação de decomposição tensorial a vetores e operadores de estado densos⁸, [49], construiu uma representação fatorada exata, cujo posto (tem o mesmo significado

⁶Embora se de a descrição do gradiente este formalismo não foi utilizado nesta dissertação em finalidades práticas, portanto, sua exposição é ilustrativa.

⁷Condições de contorno periódicas (cuja sigla é egressa do anglicismo *Periodic boundary conditions* CBPs) são um conjunto de condições de contorno frequentemente escolhidas para aproximar um sistema em larga escala, infinito, usando uma pequena parte denominada célula unitária. São as *CBPs* são frequentemente utilizadas em simulações computacionais e modelos matemáticos.

⁸Os operadores de estado densos, ou matrizes de densidade, são operadores que descrevem o estado estatístico

do anglicismo *rank*), tem baixa dimensão, dos circuitos quânticos simulados. Quando construídas de forma judiciosa, simulações tensoriais produzem um formalismo quântico de um posto com baixa dimensão que permite enorme compressão dos espaços de estado e operadores, [49]. Como lecionam Patti, et. al., [49], não obstante, nas ciências quânticas os métodos tensoriais sejam mais frequentemente associados a aproximações e truncamentos de estado, como o grupo de renormalização da matriz densidade, [228, 229], enquanto [230] traz à baila o seu uso em simulações quânticas exatas.

Da mesma forma, devido à sua conectividade de vizinho mais próximo, as fatorações de anéis tensoriais na computação quântica têm sido tradicionalmente empregadas para problemas de otimização localmente conectados, como o MaxCut 3-regular, enquanto [231], traz uma abordagem utilizando QAOA, [232], também versa sobre o mesmo tema, não obstante, se enfatizará *in loco* sua utilidade para tarefas de otimização de propósito geral, [49].

Objetivando-se analisar o algoritmo VQE com formalismo tensorial, o hamiltoniano da equação (D.6) será representado como um MPO, (é um acróstico do anglicismo *Matrix Product Operators*), $H\{\beta, \gamma\}$, com índices físicos β e γ . A energia $\mathcal{L} = E$ é então calculada com uma única contração, ver a figura (D.1, **alínea (a)**), como segue infra descrito

$$E = \sum_{\{\beta, \delta, \epsilon\}} \Psi^\beta U^{\{\beta, \gamma\}} H^{\{\gamma, \delta\}} U^{\{\delta, \epsilon\}} \Psi^\epsilon \quad (\text{D.10})$$

Seguindo-se pela equação (D.10), tem-se que $\Psi^{\{\beta\}} = \Psi^{\{\beta_0, \dots, \beta_{m-1}\}} = \sum_{\{\alpha\}} \Psi_{\alpha_0 \alpha_1}^{\beta_0}, \dots, \Psi_{\alpha_{m-1} \alpha_0}^{\beta_{m-1}}$

em que se trata de n qubit MPS, (acróstico do anglicismo Matrix Product States), de m núcleos e

$$U^{\{\beta, \gamma\}} = U^{\beta_0, \gamma_0, \dots, \beta_{m-1}, \gamma_{m-1}} = \sum_{\{\alpha\}} u_{\alpha_0, \alpha_1}^{\beta_0, \gamma_0}, \dots, u_{\alpha_{m-1}, \alpha_0}^{\beta_{m-1}, \gamma_{m-1}}$$

Que corresponde ao MPO unitário.

Como se trabalha na ausência de ruído quântico, os estados $\psi\rangle$ apresentam simetria de reversão temporal e podem ser totalmente expressos com números reais [48]. Assim, restringe-se as rotações às do gerador Pauli- Y , σ_y e implementa-se um padrão sub-unitário simples e repetitivo de duas camadas, também conhecidas como blocos. O padrão é ilustrado na figura (D.1, **alínea (a)**) em suma, uma fileira de rotações parametrizadas de um qubit $R_y(\theta)$ ($W = \sigma_y$) é seguida por uma fileira de portas *CONTROL-Z* (*CZ*), com estas últimas alternando o controle entre qubits pares e

de um sistema quântico. São utilizados quando o sistema não está em um estado puro.

ímpares. Como cada rotação de um único qubit é uma matriz densa 2×2 e cada porta *CONTROL-Z* de dois qubits é um *MPO* de classificação 2 com dois núcleos de oito elementos, os requisitos de memória da representação de circuitos não contraídos escalam apenas linearmente em n e L . Esta é uma redução exponencial nos recursos de memória clássicos em comparação com os circuitos descritos no formalismo quântico tradicional. Da mesma forma, uma representação fatorada do estado de entrada $|0\rangle$ na forma de anel tensorial requer exponencialmente menos termos, pois é representada por um *MPS* de classificação rank- $\prod_{i=0}^n 1$ com apenas n núcleos de dois elementos.

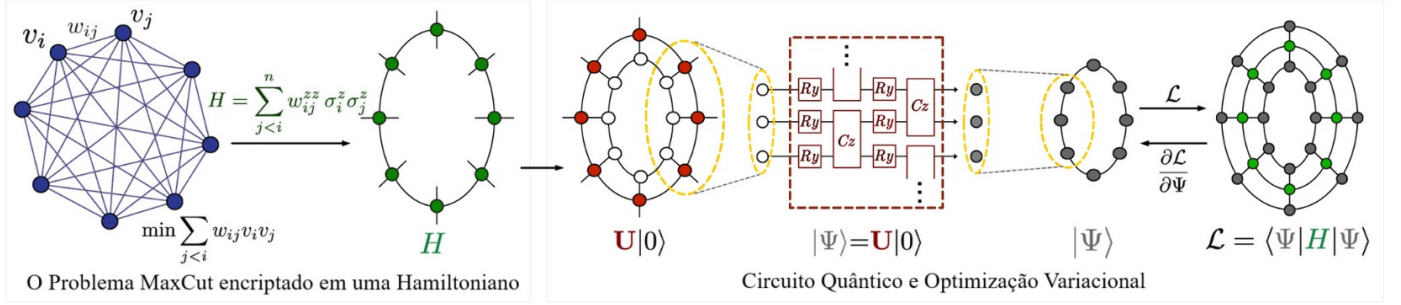


Figura D.3: *(Da esquerda para a direita)* **Alínea (a):** MaxCut tradicional e o algoritmo VQE usando fatorações em anel tensorial, que são redes de trens de tensores com condições de contorno periódicas. **Alínea (b):** Um grafo G com n vértices v_i, v_j e pesos w_{ij} é mapeado em um hamiltoniano H de n qubits na forma MPO. O estado fundamental do MPS $|\psi_g\rangle$ de H codifica a solução para MaxCut(G). *Alínea (b):* Para encontrar MaxCut(G) variacionalmente, o estado de entrada nulo, denotado por $|0\rangle$ (um *MPS*) é evoluído sob um circuito quântico parametrizado U (um MPO), produzindo um estado de saída denotado por $|\psi\rangle$. Neste caso, U codifica um circuito de profundidade L , sendo $L = 4$; representado por uma caixa vermelha pontilhada, no padrão de camadas (blocos), [49]: uma camada ou bloco de rotações R_y do eixo y de um qubit, seguida por uma camada de portas *CONTROL-Z*, que alternam entre qubits pares e ímpares. O valor esperado de energia $\mathcal{L} = E$ é minimizado via gradiente descendente. O mínimo global de L corresponde a $|\psi\rangle = |\psi_g\rangle$. Fonte: [49].

Obtém-se o H permutando-se os vértices x_i ⁹ pelos operadores de spin de Pauli-Z, denotado por σ_z^i , sendo $w_{ij}^{zz} = w_{ij}$ uma reclassificação para especificar as interações do tipo spin-zz.

⁹O fato de ter-se um polítopo na alínea (a), é meramente ilustrativo, uma vez que trata-se de um 8-esqueleto ou descrito de outra forma, trata-se de um 8-simplexo, (denotado por Δ^8 , tendo vértices, arestas, faces e células em sua composição, estes conceitos são oriundos da topologia algébrica.

D.2 *Função Custo e suas Propriedades*

Esta classe de funções possuem uma série de propriedades, cuja consideração deve ter-se em conta quando da sua seleção no que diz respeito a um dado tipo de tarefa que tenha que realizar, levando-se em conta as suas especificidades, na lição de Juan R. Terven, Diana M. Cordova-Esparza, Alfonso Ramirez-Pedraza, [233], encontram-se descritas estas propriedades:

Propriedade 1. **Convexidade:** A função é convexa se qualquer mínimo local também for o mínimo global, podem ser facilmente otimizadas usando métodos de otimização baseados em gradiente.

Propriedade 2. **Diferenciabilidade:** é diferenciável se sua derivada em relação aos parâmetros do modelo existem e são contínuos.

Propriedade 3. **Robustez:** Devem ter a capacidade de lidar com valores discrepantes e não serem afetadas por um pequeno número de valores extremos.

Propriedade 4. **Suavidade:** deve possuir um gradiente contínuo e sem transições ou picos acentuados.

Propriedade 5. **Esparsidade:** deve promover a esparsidade incentivando o modelo a produzir uma saída esparsa, em suma, útil ao trabalhar com dados de alta dimensão e quando o número de recursos importantes é pequeno.

Propriedade 6. **Monotonicidade:** a função é monótona se seu valor diminui à medida que a saída prevista se aproxima da saída real, este processo garante que o de otimização esteja caminhando em direção à solução correta.

• Algoritmo MBE e Função de Custo

O formalismo de codificações em múltiplas bases (MBE) fora proposto como um algoritmo de otimização quântica cujo objetivo é a reduzir a suscetibilidade a mínimos locais na paisagem de treinamento demonstrando por exemplo, a capacidade de resolver problemas de otimização utilizando-se do algoritmo MaxCut para vários grafos. Como já descrito, o formalismo em tela objetiva codificar variáveis em dois (ou mais) eixos de qubits para modificar a funções de custo e avaliar o produto de valores esperados de cada termo de qubit único.

- *Função de Custo para o Formalismo MBE*

Tendo-se como resultado, a redução pela metade o número de qubits necessários para um determinado problema de otimização, [234]. Quanto a construção da função de custo, o hamiltoniano formado pelo produto dos operadores não seria adequado, visto que o estado fundamental quântico que codifica não corresponde ao verdadeiro estado fundamental. Pode-se então considerar os produtos de qubits únicos. Medições $\langle X_i \rangle$ e $\langle Z_i \rangle$ ¹⁰, neste caso, são operadores de Pauli para o qubit i , nos quais os operadores supra descritos são otimizados simultaneamente, desta forma uma tal abordagem produz a função de custo no formalismo MBE que denotar-se-á como

$$\mathcal{L}_{MBE} = \sum_{j < i}^{n/2} w_{ij}^{zz} f(z_i) f(z_j) + \sum_{j < i}^{n/2} w_{ij}^{xx} f(x_i) f(x_j) + \sum_{j, i}^{n/2} w_{ij}^{zx} f(z_i) f(x_j), \quad (\text{D.11})$$

Denotando neste caso, w_{ij}^{ab} trata-se do acoplamento entre os sítios i e j com os operadores de Pauli, em tal situação, a e b , respectivamente, [235].

Definição D.2.1. *Defini-se x_i e z_i como a abreviação da medição de um único qubit de X_i e Z_i para o qubit i , e $f(x)$ trata-se da função tanh, uma função de ativação, sendo não linear aprimora a expressibilidade do algoritmo.*

Esta é a abordagem egressa da obra de

Como lecionam Patti, et. al., [49], relativamente ao algoritmo *MBE*, tem-se que algoritmo em tela para grafos ponderados. Para um grafo de n vértices G pode ser expresso de forma semelhante ao Hamiltoniano do modelo de Ising, exceto que apenas os primeiros vértices do primeiro nível ($n/2$) são mapeados para o eixo z (azul), enquanto os vértices do segundo nível ($n/2$) são mapeados para o eixo x (vermelho), permitindo assim que n vértices sejam codificados em apenas ($n/2$) qubits. Sendo n for ímpar, então o eixo x do n -ésimo qubit é desnecessário, pois pois está ausente da função custo e pode não ser medido. Objetivando-se otimizar ambos os eixos como vértices independentes, é necessário se realizar alterações no VQE padrão, inicialmente, o hamiltoniano formado pelo produto dos operadores de codificação MBE seria uma função de custo inadequada, uma vez que o estado fundamental quântico que codificaria não corresponderia ao MaxCut clássico de G , reciprocamente, deve-se concentrar nos produtos de medições de um único qubit $\langle e_i^x \rangle$ e $\langle e_i^z \rangle$, tais que ambos operadores e_i^x , e_i^z , são simultaneamente otimizados, resultando na função de custo, descrita de forma análoga à equação (D.11), que converter-se-á em

¹⁰Embora a notação se diferencie, nesta fase evidencia-se de onde é egressa a função custo.

$$\mathcal{L}_{MBE} = \sum_{j<i}^{n/2} w_{ij}^{zz} \tanh\langle\sigma_i^z\rangle \tanh\langle\sigma_j^z\rangle + \sum_{j<i}^{n/2} w_{ij}^{xx} \tanh\langle\sigma_i^x\rangle \tanh\langle\sigma_j^x\rangle + \sum_{j,i}^{n/2} w_{ij}^{zx} \tanh\langle\sigma_i^x\rangle \tanh\langle\sigma_j^z\rangle \quad (\text{D.12})$$

Esta função é utilizada para introduzir não linearidade e capturar relações mais complexas entre variáveis, para a codificação de quatro qubits e extremado para o estado fundamental, reciprocamente, pode-se utilizar a MBE com apenas dois qubits para otimizar o MaxCut deste grafo, de forma mais específica, minimizando-se a função custo MBE de dois qubits,

$$\mathcal{L}_{MBE} = w_{12}^{zz} \tanh(\langle\sigma_1^z\rangle) \tanh(\langle\sigma_2^z\rangle) + w_{12}^{xx} \tanh(\langle\sigma_1^x\rangle) \tanh(\langle\sigma_2^x\rangle) + w_{11}^{zx} \tanh(\langle\sigma_1^z\rangle) \tanh(\langle\sigma_1^x\rangle) \quad (\text{D.13})$$

Neste caso da equação (D.12), em que $\tanh(x)$ é implementada trivialmente, no caso de um computador clássico controlando a descida do gradiente, ¹¹.

• Hamiltoniano do Formalismo de Ising

Para se exemplificar considere-se um grafo de vértices, denotado por $n = 4$ com três arestas, uma unindo os vértices 1 e 2 uma unindo os vértices 3 e 4 e uma unindo os vértices 1 e 3 com os respectivos pesos ω_{12} , ω_{34} , ω_{13} . O MaxCut deste grafo pode ser otimizado usando VQE codificando-o no Hamiltoniano no formalismo de Ising para quatro qubits:

$$H = \omega_{12}\sigma_1^z\sigma_2^z + \omega_{34}\sigma_3^z\sigma_4^z + \omega_{13}\sigma_1^z\sigma_3^z \quad (\text{D.14})$$

Sendo a função de custo composta por produtos de medições de qubit único $\langle\sigma_i^x\rangle$ e $\langle\sigma_i^z\rangle$, que são processados pela função $\tanh(x)$ e peso da aresta denotado por ω_{ij} , como supra descrito:

$$\mathcal{L}_{MBE} = w_{12}^{zz} \tanh(\langle\sigma_1^z\rangle) \tanh(\langle\sigma_2^z\rangle) + w_{12}^{xx} \tanh(\langle\sigma_1^x\rangle) \tanh(\langle\sigma_2^x\rangle) + w_{11}^{zx} \tanh(\langle\sigma_1^z\rangle) \tanh(\langle\sigma_1^x\rangle) \quad (\text{D.15})$$

¹¹A Tangente hiperbólica é uma função de ativação usada vastamente em redes neurais, trata-se de uma função que reduz os valores de entrada a um intervalo $[-1, 1]$. A visualização geométrica desta função é uma curva em forma de "S" latino, que se assemelha à função Sigmoide. Tem por característica que sua saída é centrada em zero, o que significa que entradas negativas são mapeadas para saídas negativas e entradas positivas são mapeadas para saídas positivas, sendo que esta propriedade pode auxiliar a acelerar a convergência de algoritmos de otimização, como a descida de gradiente. Portanto, encontra uso também em problemas de otimização combinatória.

Agora pode-se arredondar os resultados, conforme detalhado na equação (D.17), dando ênfase novamente que, como a equação (D.11) é composta por strings de Pauli que são medidas independentemente, ou seja, um conjunto de preparações/medições para estimar os valores esperados do eixo z e um para o eixo x , o princípio da incerteza não é violado para w^{zx} , com $j = i$.

• Projeção de Dados Quânticos e Esfera de Bloch

No que tange a projeção de dados quânticos de alta dimensão em uma representação de baixa dimensão também é descrita em [236, 237], e a utilização de duas bases quânticas, em vez de uma única, provou ser útil em outros algoritmos de aprendizado de máquina quântico [49, 238].

A inclusão da função de ativação não linear $\tanh(x)$ desincentiva a extremar-se uma base em detrimento de outra, o que poderia ocorrer porque os valores ótimos, tanto de σ_i^x quanto de σ_i^z não podem ser codificados linearmente por um único estado quântico devido à condição de normalização da esfera de Bloch de cada qubit i :

$$\langle \sigma_i^z \rangle^2 + \langle \sigma_i^x \rangle^2 \leq 1 \quad (\text{D.16})$$

Neste caso, vale a igualdade para estados puros de valores no corpo dos números reais. À medida que o gradiente de $\tanh(x)$ diminui próximo aos polos ± 1 , a otimização completa de um eixo em detrimento do outro é não recomendada. Os cortes ótimos são deduzidos por um procedimento de arredondamento (detalhado abaixo), que atribui valores inteiros aos vértices, mas não afeta o processo de otimização, a função de custo, atualização de parâmetros ou a condição de normalização da equação (D.16). Dessa forma, MBE é um análogo quântico de eixo duplo para relaxamentos de programação linear, [239, 240]. Além disso, a restrição de normalização da equação (D.16), significa que $\mathcal{L}_{MBE}$ só pode descer parcialmente para mínimos locais e está melhor equipado para escapar de suas regiões de atração. A robustez do MBE contra mínimos locais é provavelmente parcialmente atribuível ao seu uso de otimização global [241], como a otimização global de estados de qubit único e a interdependência entre os vértices codificados nos eixos z e x , geralmente não relacionados. Nota-se que, por simplicidade, negligenciamos tanto os campos externos quanto as interações de base y na equação (D.11); no entanto, a adição de termos de base y poderia ser imediatamente usada para melhorar o desempenho do algoritmo, bem como otimizar simultaneamente três (em vez de dois) vértices do grafo. Finalmente, indica-se que o uso de funções de custo não lineares, que são conhecidas por aumentar a expressividade de redes neurais clássicas, pode contribuir para o sucesso do MBE com circuitos quânticos relativamente

rasos (comparados, por exemplo, neste manuscrito, ao VQE do mesmo circuito *Ansatz*). Ou seja, as funções de custo não lineares também aumentam a expressividade classicamente, em vez de apenas com maior emaranhamento quântico e correlação. Como minimizar as equações (D.11), (D.12) sob as restrições da equação (D.16) não pode produzir soluções clássicas para a equação (D.3), define-se um procedimento de arredondamento para a classificação e pontuação de um corte C para um grafo G .

• Condições de Arredondamento

A condição de arredondamento dos resultados, se dá conforme detalhado supra descritos na equação (D.17). Quanto ao *Ansatz* para esta tarefa contém duas camadas básicas compostas por portas de rotação de um e dois qubits, respectivamente RY e CZ . Sendo cada operação de rotação RY completada por 12 portas nativas com parâmetros variáveis e período $\pi/2$. Enquanto a estrutura e os parâmetros para as portas Cz usam os resultados obtidos previamente. De acordo com o algoritmo *MBE-VQE*, a contagem de cortes prevista é definida como resultados r . Como minimizar a equação (D.17) sob as restrições da equação (D.16) não pode produzir soluções clássicas para a equação (8.3), definimos um procedimento de arredondamento para a classificação e pontuação de um corte C para um grafo G , conforme detalhado em

$$\mathcal{C}_{MBE}(\hat{\theta}, G) = \sum_{j < i}^{n/2} w_{ij}^{zz} [1 - R(\langle \sigma_i^z \rangle) R(\langle \sigma_j^z \rangle)] + \sum_{j < i}^{n/2} w_{ij}^{xx} [1 - R(\langle \sigma_i^x \rangle) R(\langle \sigma_j^x \rangle)] + \sum_{j, i}^{n/2} w_{ij}^{zx} [1 - R(\langle \sigma_i^z \rangle) R(\langle \sigma_j^x \rangle)] \quad (D.17)$$

Em que $R(x)$, denota o procedimento clássico de arredondamento, para simplificar a expressão, pode-se definir os pesos de todas as arestas,

$$w_{ij}^{xx} = w_{ij}^{zz} = w_{ij}^{zx} = 1 \quad (D.18)$$

Neste caso em particular, a solução correta deste problema de *MaxCut* é 3.

Em suma, a função $R(x)$, classicamente implementada arredonda os valores esperados medidos para ± 1 .

• Solucionadores Quânticos com Compressão Polinomial do Espaço

Não obstante, esta técnica não será utilizada na presente pesquisa, discorreu-se apenas *en passant*, pois abre possibilidades para futuros trabalhos em que haja uma necessidade de mais

acurácia nos resultados. Resolve-se otimizações combinatórias sobre variáveis binárias $O(n^K)$, utilizando-se apenas N qubits, para $k \in \mathbb{Z}$, sendo um inteiro adequado à escolha. Obtém-se uma tal compressão codificando as variáveis em m correlações de matriz de Pauli entre múltiplos qubits, sem perda de generalidade, pode-se abreviar a notação $[m] := \{1, 2, \dots, m\}$. Seja $\mathbf{x} := x_{ii \in [m]}$ que denota uma *string* de variáveis de otimização e escolha-se um subconjunto específico $\prod := \{\prod_i\}_{i \in [m]}$ de $m \leq 4n - 1$, sequências de Pauli sem traços $\prod_i$, ou seja, uma n -upla de produtos tensoriais de matrizes identidade $\mathbb{1}$ ou de Pauli (X, Y e Z), excluindo a matriz identidade $\mathbb{1}^{\otimes n}$.

Definição D.2.2. *Define-se uma codificação da correlação de Pauli, (cujo acrônimo em inglês é PCE, Pauli-Correlation Encoding), com relação a $\prod$ como sendo*

$$x_i = \text{sign}(\langle \prod_i \rangle), \quad \forall i \in [m] \quad (\text{D.19})$$

Sendo aqui sign uma função sinal e $\langle \prod_i \rangle := \langle \psi | \prod_i | \psi \rangle$ trata-se do valor esperado de $\prod_i$ sobre um estado quântico, $|\psi\rangle$.

Valores esperados de magnitude $\theta(1/m)$ são suficientes para garantir a existência de tais estados para todas as bits strings $\mathbf{x}$, isto de um ponto de vista estritamente teórico, experimentalmente, no entanto, observam-se magnitudes significativamente maiores que $\theta(1/m)$. Deve-se concentrar em strings com k matrizes de Pauli de qubit único que não têm traços¹². Em particular, as codificações $\prod_{(k)} := \{\prod_1^{(k)}, \dots, \prod_m^{(k)}\}$, em que cada $\prod_i^{(k)}$, trata-se de uma permutação qualquer $X^{\otimes k} \otimes \mathbb{1}^{\otimes n-k}, Y^{\otimes k} \otimes \mathbb{1}^{\otimes n-k}, Z^{\otimes k} \otimes \mathbb{1}^{\otimes n-k}$ (veja o painel esquerdo da Fig. 1 para um exemplo com $k = 2$). Sendo assim, $\prod_{(k)}$ é a união de 3 conjuntos de strings que comutam mutuamente, sendo isto experimentalmente conveniente, pois são necessárias somente três configurações de medição.

Para as codificações de qubit único, descritas na lição de Patti, [49] e de Fuller et al [242], por sua vez, correspondem a PCEs com $k = 1$. O problema específico cuja tratativa de resolução se dá nesta secção é para o Max-Cut ponderado, um problema de otimização da classe NP-complexo paradigmático sobre um grafo ponderado G , definido por uma matriz de adjacência (simétrica) $W \in \mathbb{R}^{m \times m}$, sendo que contém os elementos já descritos anteriormente como o formalismo do Max-Cut, a função de custo, como em outros formalismos.

¹²Matrizes que não têm traços são as que tem traço nulo.

Apêndice E

Variedades

E.1 Variedades Topológicas

Definição E.1.1 (Variedades Topológicas). *Seja M um espaço topológico. Diz-se que M é uma k -variedade se, para todo $p \in M$ existe:*

- *uma vizinhança $U \subset M$ de p ;*
- *um conjunto aberto $V \subset \mathbb{R}^k$;*
- *um homeomorfismo $\varphi : U \rightarrow V$.*

Definição E.1.2 (Homeomorfismo). *Um mapa $\phi : X \rightarrow Y$ é um homeomorfismo se for um mapa bijetor contínuo com uma inversa contínua. Sendo que aos homeomorfismos φ , referem-se aos homeomorfismos de M .*

Observação E.1.1 (Variedade Topológica). *Pode se acrescentar que uma variedade topológica é um espaço topológico que é localmente euclidiano, paracompacto de Hausdorff, (obedecendo ao segundo axioma da enumerabilidade). Se as vizinhanças euclidianas locais $\mathbb{R}^n \xrightarrow{\cong} U \subset X$ são todas de dimensão n para um $n \in \mathbb{N}$ fixo, então a variedade topológica é dita uma variedade n -dimensional.*

Observação E.1.2. *Uma variedade topológica descrita na definição (E.1.1), precisa ser sigma-compacta. Isso não é uma condição extra, desde que haja um conjunto enumerável de componentes conexos. Além disso, variedades com um conjunto de componentes conexos não enumeráveis, não figuram nas definições mais usuais.*

Definição E.1.3 (Cartas). Dada uma variedade topológica n -dimensional M , pela definição (E.1.1), então o homeomorfismo $\varphi : U \subset M \xrightarrow{\cong} V \subset \mathbb{R}^n$ serão denominados de cartas de M , (denota-se por (U, φ)).

Definição E.1.4 (Atlas). uma cobertura aberta de M por cartas $\{U \subset \mathbb{R}^n \xrightarrow{\varphi_i} V \subset M\}_{i \in I}$ é denominado atlas da variedade topológica.

Observação E.1.3. Uma notação alternativa seria $A = \{\varphi_\alpha | \alpha \in I\}$ seja uma coleção de cartas com domínios U_α . Se $\bigcup_{\alpha \in I} U_\alpha = M$, então denominar-se-á M de um atlas da variedade.

Definição E.1.5 (Funções de Transição). Denotando-se para cada $i, j \in I$ a interseção do i -ésima carta com a j -ésima carta em tal atlas por

$$U_{ij} := U_i \cap U_j \tag{E.1}$$

então o homeomorfismo induzido $\mathbb{R}^n \supset \varphi_i^{-1}(U_{ij}) \xrightarrow{\varphi_i} U_{ij} \xrightarrow{\varphi_j} \varphi_j^{-1} \subset \mathbb{R}^n$ denominar-se-á funções de transição.

Observação E.1.4. Sejam φ_1, φ_2 duas cartas com domínios U_1 e U_2 que se interseccionam, então, existe um homeomorfismo $\varphi_{12} : \varphi_1(U_1 \cap U_2) \rightarrow \varphi_2(U_1 \cap U_2)$ em que $\varphi_{12} = \varphi_2 \circ \varphi_1^{-1}$. Tal homeomorfismo é denominado de funções de transição.

E.2 Variedades Diferenciáveis

Quanto aos conceitos envolvendo variedades diferenciáveis formalizam o conceito de um espaço que localmente é como um espaço euclidiano, tanto do ponto de vista topológico, quanto da sua estrutura diferenciável. Trata-se de uma abstração das noções usuais de curvas e superfícies em $\mathbb{R}^n$. No que tange à geometria diferencial ocupa-se do estudo das variedades diferenciáveis. Algumas construções egressas da análise infinitesimal, podem ser estendidas do espaço euclidiano a qualquer variedade. Por outro lado, a análise global em variedades requer técnicas e métodos novos e mesmo as questões mais elementares resultam muitas vezes em problemas em aberto.

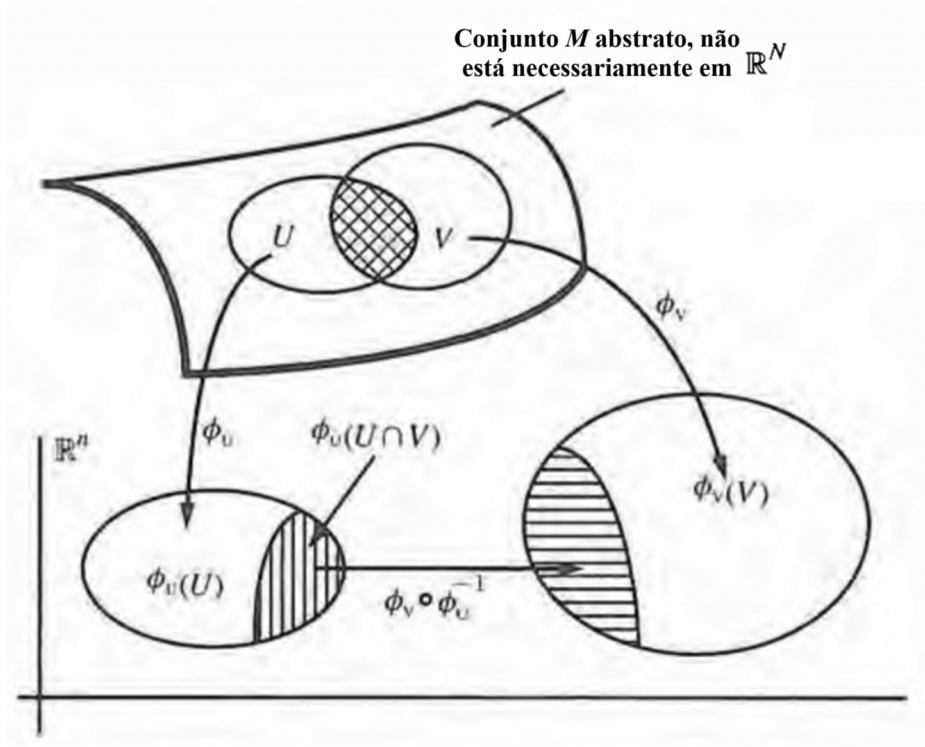


Figura E.1: Um exemplo gráfico de uma variedade diferenciável.

Definição E.2.1. Para $p \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$, então uma $\mathcal{C}^p$ -variedade p , é:

- uma variedade topológica M pela definição (E.1.1);
- um atlas $\{U \subset M \xrightarrow{\varphi_i} V \subset \mathbb{R}^n\}_{j \in J}$ pela definição (E.1.4), cujas transições de coordenadas são p vezes continuamente diferenciáveis.

$$\left(M, \{U_i \xrightarrow{\varphi_i} \mathbb{R}^n\}_{i \in I}\right) \xrightarrow{f} \left(N, \{V_j \xrightarrow{\psi_j} \mathbb{R}^{n'}\}_{j \in J}\right) \quad (\text{E.2})$$

Possui as propriedades seguintes:

- é uma função contínua $f : M \rightarrow N$, tal que $\forall i \in I$ e $j \in J$, então:
- $\mathbb{R}^n \supset (f \circ \varphi_i)^{-1}(V_j) \xrightarrow{\varphi_i} f^{-1}(V_j) \xrightarrow{f} V_j \xrightarrow{\psi_j^{-1}} \mathbb{R}^{n'}$.

É uma função p -upla diferenciável entre subconjuntos abertos do espaço euclidiano.

Observação E.2.1 (Categoria **Diff** de Variedades Diferenciáveis). Em analogia à observação, existe uma categoria chamada Diff_p cujos objetos são variedades $\mathcal{C}^p$ -diferenciáveis e cujos morfismos são funções $\mathcal{C}^p$ -diferenciáveis, para $p \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$ dado.

Definição E.2.2 (Difeomorfismo). *Sejam duas variedades suaves M e N , pela definição (E.1.2), então uma função suave $f : M \rightarrow N$ é denominada de difeomorfismo, se houver uma função inversa $M \leftarrow N : g$, que também é uma função suave, portanto, se f for um isomorfismo na categoria $\mathbf{Diff}_\infty$ da observação (E.2.1).*

Aqui é importante notar que, embora uma variedade topológica tenha apenas uma propriedade de um espaço topológico, uma variedade diferenciável carrega uma estrutura extra encriptada no atlas:

Definição E.2.3. *Seja M uma variedade topológica e sejam $\left(U_i \xrightarrow[\cong]{\varphi_i} \mathbb{R}^n\right)_{i \in I}$ e $\left(V_j \xrightarrow[\cong]{\varphi_j} \mathbb{R}^n\right)_{j \in J}$ dois atlas pela definição (E.1.4), ambos tornando M uma variedade suave consoante à definição (E.2.1).*

Então, há um difeomorfismo (de acordo com a definição (E.2.2)) da forma:

$$f : \left(U_i \subset M \xrightarrow[\cong]{\varphi_i} \mathbb{R}^n\right)_{i \in I} \xrightarrow{\cong} \left(V_j \subset N \xrightarrow[\cong]{\varphi_j} \mathbb{R}^n\right)_{j \in J} \quad (\text{E.3})$$

Exatamente se a função identidade no conjunto subjacente de M constitui tal difeomorfismo, uma vez que se f é um difeomorfismo, então também o será $f^{-1} \circ f = \text{id}_M$ é um difeomorfismo. Que a função identidade seja um difeomorfismo entre M equipado com esses dois atlas significa, pela definição (E.2.1), que $\forall_{\substack{i \in I \\ j \in J}} \left(\varphi_i^{-1}(V_j) \xrightarrow{\varphi_i} V_j \xrightarrow{\varphi_j} \mathbb{R}^n \text{ é suave} \right)$.

Observe que as funções à direita podem ser escritas equivalentemente como

$$\mathbb{R}^n \supset \varphi_i^{-1}(U_i \cap U_j) \xrightarrow{\varphi_i} (U_i \cap V_j) \xrightarrow{\psi_j} \psi_j^{-1}(U_i \cap V_j) \subset \mathbb{R}^n \quad (\text{E.4})$$

Evidenciando sua analogia com as funções de transição. Portanto, o difeomorfismo induz uma relação de equivalência no conjunto de atlas suaves que existem em uma dada variedade topológica M . Uma classe de equivalência [205], com relação a essa relação de equivalência é denominada de estrutura diferenciável em M .

E.2.1 Esferas

Para entender a Fibrado de Hopf, precisa-se primeiro definir a n -esfera e algumas de suas propriedades básicas.

Definição E.2.4. *Denotada por $\mathbb{S}^n$, é o conjunto de pontos $\{(x_1, \dots, x_{n+1}) \in \mathbb{R}^{n+1} \mid x_1^2 + \dots + x_{n+1}^2 = 1\}$. Note que $\mathbb{S}^n \subset \mathbb{R}^{n+1}$, [182].*

Teorema E.2.1. $\mathbb{S}^1$ é uma variedade 1-diferenciável

Prova. Seja a série de difeomorfismos de $(-1, 1) \rightarrow \mathbb{S}^1$:

- $\varphi_1(x) = (x, \sqrt{1-x^2})$;
- $\varphi_2(x) = (x, -\sqrt{1-x^2})$;
- $\varphi_3(x) = (\sqrt{1-x^2}, x)$;
- $\varphi_4(x) = (-\sqrt{1-x^2}, x)$.

Então $\varphi_1, \dots, \varphi_4$ são cartas que formam um atlas $\mathbb{S}^1$, como mostrado no diagrama abaixo. Como $(-1, 1) \subset \mathbb{R}$, $\mathbb{S}^1$ é uma 1-variedade. Não obstante, tecnicamente a definição (E.1.1), apresente cartas como mapas de $U \subset M \rightarrow \mathbb{R}^n$ e não a outra direção, essas cartas são necessariamente suavemente invertíveis como difeomorfismos e portanto, a direção em que são construídas não é importante aqui.

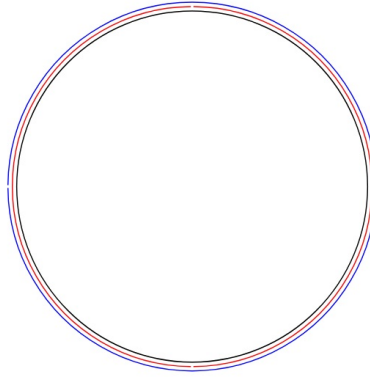


Figura E.2: As cartas em uma 1-esfera.

Pode-se afirmar que essas quatro cartas formam uma estrutura diferenciável em $\mathbb{S}^1$. De fato, $\varphi_3 \circ \varphi_1^{-1} = (\sqrt{1-x^2}, x)$, que é de fato uma função suave e da mesma forma, todos os outros mapas de transição relevantes são suaves. Portanto, $\mathbb{S}^1$ é uma 1-variedade diferenciável.

□

Teorema E.2.2. A esfera $\mathbb{S}^n$ é compacta.

Demonstração. Pode-se limitar $\mathbb{S}^n$ pelo retângulo aberto $(-1, 5, 1, 5)^n$. Além disso, $\mathbb{S}^n$ é um subespaço euclidiano, portanto, pelo teorema de Heine-Borel, é suficiente mostrar que $\mathbb{S}^n$ é fechado. Pode-se fazer isso mostrando que seu complemento é aberto. Seja $x \in \mathbb{R}^{n+1} \setminus \mathbb{S}^n$ em que $x = (x_1, \dots, x_{n+1})$. Então $x_1, \dots, x_{n+1} \neq 1$. Seja $t = x_1^2 + \dots + x_n^2$, então tem-se que $x \in Br(x) \subset$

$\mathbb{R}^{n+1} \setminus \mathbb{S}^n$, indicando que o complemento de $\mathbb{S}^n$ é aberto. Portanto, $\mathbb{S}^n$ é fechado e pelo Teorema de Heine-Borel, $\mathbb{S}^n$ é compacto.

□

E.2.2 n -Esferas como Variedades Suaves

Primeiramente algumas definições úteis, seguem abaixo.

Definição E.2.5 (Cartas Compatíveis). *Seja M um espaço topológico, $n \in \mathbb{N}$. Sejam (U, φ) e (V, ψ) cartas n -dimensionais de M . Então, (U, φ) e (V, ψ) são C^k -compatíveis se, e somente se, seu mapa de transição: $\psi \circ \varphi^{-1} : \varphi(U \cap V) \rightarrow \psi(U \cap V)$, é da classe C^k .*

Definição E.2.6 (Cartas Compatíveis Suaves). *As considerações são análogas à definição (E.2.5), sejam as cartas $((U, \varphi)$ e (V, ψ) , são suavemente compatíveis se, e somente se, seu mapa de transição: $\psi \circ \varphi^{-1} : \varphi(U \cap V) \rightarrow \psi(U \cap V)$, é da classe C^∞ .*

Para $n \in \mathbb{N}$, a esfera $\mathbb{S}^n$ torna-se uma variedade suave, com atlas consistindo em dois mapas locais que são dados pelas funções inversas da projeção estereográfica dos dois polos da esfera no hiperplano equatorial, como segue:

$$\left\{ \mathbb{R}^n \xrightarrow[\cong]{\varphi_i^{-1}} \mathbb{S}^n \setminus \{p_i\} \right\}_{i \in \{p_+, p_-\}} \quad (\text{E.5})$$

Observação E.2.2. *A função de transição induzida por $\varphi_- \circ \varphi_+ : \mathbb{R}^n \setminus 0 \rightarrow \mathbb{R}^n \setminus 0$ é uma função racional e portanto, suave, pode-se também concluir o mesmo pelo argumento seguinte, que as cartas são compatíveis e então, tem-se um atlas para $\mathbb{S}^2$.*

Finalmente, a n -esfera é um espaço topológico de Hausdorff paracompacto. Para se verificar isto basta se observar que:

- $\mathbb{S}^n \subset \mathbb{R}^{n+1}$ é um subespaço compacto pelo teorema de Heine-Borel¹. Espaços compactos são evidentemente paracompactos. Além disso, o espaço euclidiano, como qualquer espaço métrico, é Hausdorff e subespaços de espaços de Hausdorff são Hausdorff;

¹Pode-se ser descrito da forma seguinte: Para um subconjunto S do espaço euclidiano $\mathbb{R}^n$, as duas afirmações a seguir são equivalentes: S é compacto, ou seja, toda cobertura aberta de S tem uma subcobertura finita; S é fechado e limitado.

- A n -esfera tem uma estrutura evidente de um CW-complexo², [182] e estes são espaços de Hausdorff paracompactos.

E.2.3 Esfera de Bloch como Variedade Diferenciável

Na superfície de uma esfera de Bloch dá-se a representação de um bit clássico, mais especificamente, nos polos da esfera. A representação do bit clássico probabilístico, ou seja, um bit que é 0 com probabilidade $1 - p$ e 1 com probabilidade p , é dada pelo ponto no eixo z com coordenada $2p - 1$. O interior da Esfera de Bloch, denotado por $\overset{\circ}{S}^2$ é usado para descrever os estados de um qubit na presença de decoerência. A maneira padrão de escrever o estado de um qubit usando a Esfera de Bloch é descrita na dissertação, utilizando o conceito de estado misto, que é o estado maximalmente misto de um único qubit, representado pelo centro da esfera de Bloch, devido à sua simetria inerente, em que o ponto central representa uma superposição igual de todos os estados possíveis. Primeiramente, irá se descrever a esfera S^2 , como variedade diferenciável, depois, se explicitará de duas maneiras de como a esfera de Bloch pode ser descrita como uma variedade diferenciável. Em suma, apresenta-se-á as técnicas para descrição da esfera como variedade diferenciável, uma utilizando a projeção estereográfica, com duas cartas que irão cobrir a esfera e a outra com seis cartas, que tem o mesmo objetivo, a primeira, mais usual será feita *en passant*, por que é mais usual e de mais fácil construção, a outra será dada uma atenção maior com mais riqueza de detalhes devido à complexidade, inclusive uma propedêutica antes da demonstração final que fara uso do conceito de mapeamento do cubo. No segundo caso, são utilizadas seis cartas e seis hemisférios, o que confere uma elegância e estética na resolução, sendo ambos resultados equivalentes e de grande valia para que se possa determinar que a esfera de Bloch além de apresentar propriedades topológicas, possui também propriedades de diferenciabilidade.

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \quad (\text{E.6})$$

Em que $0 \leq \theta \leq \pi$ e $0 \leq \varphi \leq 2\pi$.

²Um CW-complexo é construído tomando a união de uma sequência de espaços topológicos $\emptyset = X_{-1} \subset X_0 \subset X_1 \subset \dots$ tal que cada X_k é obtido de X_{k-1} colando cópias de k -células $(e_\alpha^k)_\alpha$, cada uma homeomórfica à k -bola aberta B^k , para X_{k-1} por colagem contínua de mapas $g_\alpha^k : \partial e_\alpha^k \rightarrow X_{k-1}$. Os mapas também são chamados de mapas anexados. Assim, como um conjunto, $X_k = X_{k-1} \sqcup_\alpha e_\alpha^k$. Cada X_k é denominado de k -esqueleto do complexo.

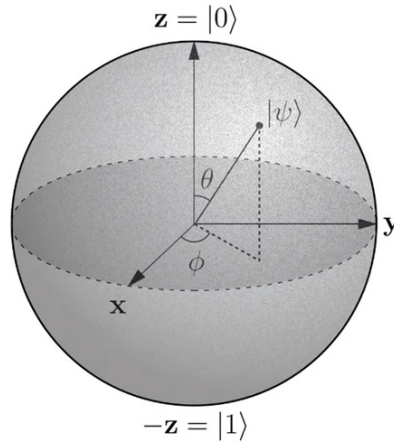


Figura E.3: Representação geométrica em uma 2-esfera, $\mathbb{S}^2$ de Bloch.

E.2.3.1 Cartas e o Homeomorfismo da Esfera $\mathbb{S}^2$

Considere-se um aberto $U \subset \mathbb{S}^2$, neste caso, $\mathbb{S}^2 \setminus \{N, S\}$ em que $\mathbb{S}^2 \subseteq \mathbb{R}^3$, isso pode ser justificado pelas proposições (E.2.1) e (E.2.2).

Proposição E.2.1. *Seja uma 2-esfera $\mathbb{S}^2$ com os dois polos removidos, então, ter-se-á um conjunto aberto em $\mathbb{R}^3$.*

Prova. O que é dado na proposição: $\mathbb{S}^2$, a esfera unitária em $\mathbb{R}^3$. Os dois polos são $(0, 0, 1)$ e $(0, 0, -1)$. Um conjunto aberto em um espaço topológico é um conjunto que contém uma vizinhança de cada um de seus pontos. A topologia euclidiana em $\mathbb{R}^3$ é definida pelas bolas abertas. A esfera $\mathbb{S}^2$ é um subconjunto de $\mathbb{R}^3$. Deve-se exibir que o conjunto $\mathbb{S}^2 \setminus \{(0, 0, 1), (0, 0, -1)\}$ é um conjunto aberto em $\mathbb{R}^3$, desta forma provando que contém uma vizinhança de cada um de seus pontos. Isso pode ser feito por passos:

- Passo 1: Considere qualquer ponto $p \in \mathbb{S}^2 \setminus \{(0, 0, 1), (0, 0, -1)\}$;
- Passo 2: Seja d a distância mínima entre p e os dois polos. Como p não é um dos polos, $d > 0$;
- Passo 3: Considere uma bola aberta com raio $\frac{d}{2}$ centrado em p . Esta bola está contida em $\mathbb{S}^2 \setminus \{(0, 0, 1), (0, 0, -1)\}$;
- Passo 4: Como esta bola aberta é uma vizinhança de p e p foi escolhido arbitrariamente, qualquer ponto em $\mathbb{S}^2 \setminus \{(0, 0, 1), (0, 0, -1)\}$ tem uma vizinhança contida no conjunto;
- Passo 5: Portanto, $\mathbb{S}^2 \setminus \{(0, 0, 1), (0, 0, -1)\}$ é um conjunto aberto.

□

Observação E.2.3. A esfera $\mathbb{S}^2$ com os dois polos removidos é um conjunto aberto em $\mathbb{R}^3$.

Proposição E.2.2. O mapa $(x, y) \mapsto (\phi, \theta)$ é um homeomorfismo entre a região $U = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 > 0\}$ e $\mathbb{R}^2$.

Prova. Seja o mapa de $U = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 > 0\}$ para $(\phi, \theta) \in \mathbb{R}^2$. A relação entre (x, y) e (ϕ, θ) não é explicitamente definida, não obstante, o é implicitamente assumida como a conversão padrão de coordenadas cartesianas para polares. Para abordar o problema objetivando-se provar que um mapa é um homeomorfismo, é necessário mostrar que é uma bijeção, contínua, e sua inversa também o é. Será necessário certificar-se que a definição do mapa é consistente com as coordenadas polares, o que pode levar a um problema com o domínio. Provar-se-á também por passos:

- **Definindo-se o homeomorfismo:** Definir a aplicação $f : U \rightarrow \mathbb{R}^2$ como sendo $f(x, y) = (\phi, \theta)$, em que $\phi = \arctan(\frac{y}{x})$ e $\theta = \sqrt{x^2 + y^2}$. Esta aplicação converte um ponto (x, y) em U para suas coordenadas polares (ϕ, θ) ;
- **Mostre que a aplicação é bijetiva:** *Injetividade:* A aplicação f é injetiva, pois se $f(x_1, y_1) = f(x_2, y_2)$, então $(\phi_1, \theta_1) = (\phi_2, \theta_2)$. Isso implica que $\phi_1 = \phi_2$ e $\theta_1 = \theta_2$. *Sobrejetividade:* A aplicação f é sobrejetiva. Para qualquer $(\phi, \theta) \in \mathbb{R}^2$, o ponto (x, y) dado por $x = \theta \cos(\phi)$ e $y = \theta \sin(\phi)$ é mapeado para (ϕ, θ) ;
- **Mostre que o mapa é contínuo:** O mapa f é contínuo porque é uma composição de mapas contínuos (por exemplo, as funções trigonométricas e a função raiz quadrada);
- **Mostrar que a aplicação inversa é contínua:** A função inversa $f^{-1} : \mathbb{R}^2 \rightarrow U$ é definida como $f^{-1}(\phi, \theta) = (\theta \cos(\phi), \theta \sin(\phi))$. A função inversa também é contínua, pois é uma composição de funções contínuas (funções trigonométricas e a função raiz quadrada);
- O mapa $f(x, y) = (\phi, \theta)$ é um homeomorfismo entre U e $\mathbb{R}^2$ porque é um mapa bijetivo e contínuo e seu inverso também é contínuo, portanto é $\boxed{f(x, y) = (\phi, \theta)}$.

□

Observação E.2.4. Um estado de qubit pode ser representado como um vetor na esfera de Bloch. Por exemplo, o estado $|\psi\rangle = \left(\cos \frac{\theta}{2}, \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi}\right)$ representa um ponto na esfera, em que θ é o ângulo polar e φ é o ângulo azimutal. Este mesmo estado também pode ser representado como um ponto no círculo em $\mathbb{R}^2$, que é a projeção da esfera de Bloch.

Quanto ao homeomorfismo, tem-se que:

$$\varphi : U \rightarrow \mathbb{R}^2 \quad (\text{E.7})$$

Observação E.2.5. *O homeomorfismo definido na expressão (E.7), mapeia um ponto no espaço de estados para suas coordenadas (θ, φ) , desta forma, têm-se que $\varphi(|\psi\rangle) = (\theta, \varphi)$, sendo a inversa, denotada como $\varphi^{-1}(\theta, \varphi) = |\psi(\theta, \varphi)\rangle$, o que se pode denotar por $\psi(\theta, \varphi)$.*

E.2.3.2 Atlas, a Esfera de Bloch com Estrutura de Variedade Diferenciável

Note-se que o discorreu-se acima trata-se de uma projeção estereográfica que é o nome de um homeomorfismo específico (para qualquer $n \in \mathbb{N}$) da n -esfera $\mathbb{S}^n$ com um ponto $p \in \mathbb{S}^n$ removido do espaço euclidiano $\mathbb{R}^n$, no caso em tela $n = 2$.

$$\mathbb{S}^2 \setminus \{p\} \xrightarrow{\cong} \mathbb{R}^2 \quad (\text{E.8})$$

Considera-se tanto a 2-esfera quanto o espaço euclidiano $\mathbb{R}^2$ como subespaços topológicos de $\mathbb{R}^3$ da maneira padrão, tais que se intersectam no equador da 2-esfera, [243].

No caso de $\{p\} \in \mathbb{S}^2$ um dos polos correspondentes, a projeção estereográfica é o mapa que envia um ponto $x \in \mathbb{S}^2 \setminus \{p\}$ ao longo da reta que o conecta p ao plano equatorial. Se a a projeção estereográfica for aplicada a ambos os polos possíveis $\{p+, p-\} \in \mathbb{S}^2$ da esfera, dado um plano equatorial fixo, obtêm-se dois homeomorfismos diferentes.

$$\left\{ \mathbb{S}^2 \setminus \{p_i\} \xrightarrow[\cong]{\varphi_i} \mathbb{R}^2 \right\}_{i \in \{p+, p-\}} \quad (\text{E.9})$$

Observação E.2.6. *O conjunto dessas duas projeções constitui um atlas que apresenta a n -esfera como uma variedade topológica, de fato uma variedade diferenciável e como uma variedade suave. Para $n = 2$ (o caso em tela) e com $\mathbb{R}^2 \cong \mathbb{C}$ considerado como o plano complexo, então este atlas apresenta a 2-esfera como uma variedade complexa: a esfera de Riemann.*

E.2.3.3 Cartas no Caso da Projeção Estereográfica

A esfera de Bloch pode ser identificada com a 2-esfera $\mathbb{S}^2 \subseteq \mathbb{R}^3$ e admite duas cartas, (vide equação (E.8)) e um atlas diferenciável (vide equação (E.9)), dado por projeções estereográficas, (em uma notação mais canônica):

E.2.3.4 Cartas Norte e Sul

A referência às cartas norte e sul dizem respeito aos polos da esfera, no caso em particular $n = 2$, denominar-se-á doravante, os polos norte e sul por respectivamente, $\{p_N, p_S\}$, cujos valores são $p_N = (0, 0, 1), p_S = (0, 0, -1)$.

- **Carta Norte** (U_N, φ_N)

Seja $U_N = \mathbb{S}^2 \setminus \{p_N\}$, ou seja, , neste caso o ponto referente ao polo norte da 2-esfera é subtraído, como a carta é composta por uma 2-upla, então, resta a descrição do mapa, que é $\varphi_N(x, y, z) = \left(\frac{x}{1-z}, \frac{y}{1-z}\right)$, eis a carta em questão.

- **Carta Sul** (U_S, φ_S)

Como no caso anterior, têm-se que $U_N = \mathbb{S}^2 \setminus \{p_S\}$, quanto ao mapa, $\varphi_S(x, y, z) = \left(\frac{x}{1+z}, \frac{y}{1+z}\right)$.

Observação E.2.7. *Note-se que tanto para a carta norte, quanto para a sul existem restrições, que são respectivamente dadas por o denominador $1 - z$ se anula quando $z = 1$, por isso a carta não está definida nesse ponto, o denominador $1 + z$ se anula quando $z = -1$, pela mesma razão da anterior a carta não está definida no polo sul. Portanto, as cartas não cobrem toda a esfera, com exceção dos respectivos pontos, $\{p_N, p_S\}$, (vide observação (E.2.6)).*

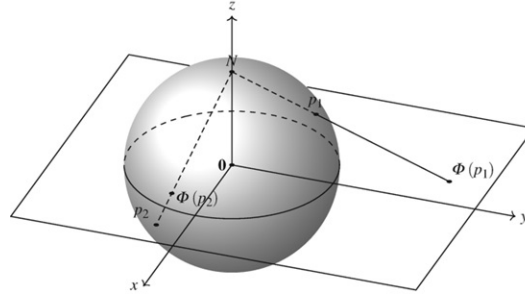


Figura E.4: Projeção Estereográfica. Fonte: [243]

E.2.3.5 Exemplos Aplicados à Esfera de Bloch

Exemplo E.2.1. Estado $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$. $\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = 0; (x, y, z) = (1, 0, 0)$; aplicando φ_N :

$$\varphi_N(1, 0, 0) = \left(\frac{1}{1-0}, \frac{0}{1-0}\right) = (1, 0)$$

Exemplo E.2.2. Estado $|1\rangle$. $\theta = \pi, \varphi = 0$; $(x, y, z) = (0, 0, -1)$; esse ponto em questão não pertence à φ_S , uma vez que $1 + z = 0$, entretanto, pode-se aplicar φ_S :

$$\varphi_S(0, 0, -1) = \left(\frac{0}{2}, \frac{0}{2}\right) = (0, 0)$$

Exemplo E.2.3. Estado $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$. $\theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = \pi$; $(x, y, z) = (-1, 0, 0)$; aplicando-se φ_N :

$$\varphi_N(-1, 0, 0) = (-1, 0)$$

E.2.3.6 As seis Cartas que Cobrem a 2-Esfera

Como leciona [244], para o caso da 2-esfera, ter-se-ão seis cartas, portanto, é factível que pode-se construir cartas como seguem infra-descritas que dão resultados análogos, pois cobrem a 2-esfera de Bloch, não obstante, seja mais usual utilizar-se da projeção estereográfica. Primeiramente, considerar-se-á um caso mais geral, para que depois se tenha condição de se particularizar com um nível de compreensão mais adequado. Seja a 2-esfera unitária, $\mathbb{S}^2$, descrita em sua forma canônica como sendo $x^2 + y^2 + z^2 = 1$, sendo que $\mathbb{S}^2 \subseteq \mathbb{R}^3$, de posse destas informações poder-se-á introduzir um exemplo ilustrativo, antes de iniciar é relevante introduzir a definição de disco, que segue abaixo:

Definição E.2.7 (Discos). *Um disco n -dimensional de raio r é o conjunto de pontos de distância $d \geq r$, denominado disco fechado ou $d < r$, denominado disco aberto a partir de um ponto fixo no espaço euclidiano de dimensão n . O n -disco para $n \geq 3$ denomina-se de bola, e a fronteira do n -disco é uma $(n - 1)$ -hiperesfera. O n -disco padrão é denotado $\mathbb{D}^n$ ou $\mathbb{B}^n$, tem seu centro na origem e raio $r = 1$. Seja as equações abaixo que descrevem o caso em tela, relativamente aos discos e suas projeções nos hemisférios.*

Exemplo E.2.4 (cobrir uma 2-esfera usando 6 hemisférios). *Defina os 6 hemisférios e suas respectivas cartas correspondentes e mostre que as cartas cobrem toda a esfera (E.5):*

- **Definindo os 6 hemisférios:**

$$U_1 = \{(x, y, z) \in \mathbb{S}^2 \mid x > 0\}, \quad \varphi_1(x, y, z) = (y, z), \text{ hemisfério frontal;}$$

$$U_2 = \{(x, y, z) \in \mathbb{S}^2 \mid x < 0\}, \quad \varphi_2(x, y, z) = (y, z), \text{ hemisfério posterior;}$$

$$\begin{aligned}
U_3 &= \{(x, y, z) \in \mathbb{S}^2 \mid y > 0\}, & \varphi_1(x, y, z) &= (x, z), & \text{hemisfério direito;} \\
U_4 &= \{(x, y, z) \in \mathbb{S}^2 \mid y < 0\}, & \varphi_2(x, y, z) &= (x, z), & \text{hemisfério esquerdo;} \\
U_5 &= \{(x, y, z) \in \mathbb{S}^2 \mid z > 0\}, & \varphi_5(x, y, z) &= (x, y), & \text{hemisfério superior;} \\
U_6 &= \{(x, y, z) \in \mathbb{S}^2 \mid z < 0\}, & \varphi_6(x, y, z) &= (x, y), & \text{hemisfério inferior.}
\end{aligned}$$

• **Definindo as Cartas:**

$$\begin{aligned}
\phi_1 &: \text{projecção no plano } -yz, & \phi_1(x, y, z) &= (y, z); \\
\phi_2 &: \text{projecção no plano } -yz, & \phi_2(x, y, z) &= (y, z); \\
\phi_3 &: \text{projecção no plano } -xz, & \phi_3(x, y, z) &= (x, z); \\
\phi_4 &: \text{projecção no plano } -xz, & \phi_4(x, y, z) &= (x, z); \\
\phi_5 &: \text{projecção no plano } -xy, & \phi_5(x, y, z) &= (x, y); \\
\phi_6 &: \text{projecção no plano } -xy, & \phi_6(x, y, z) &= (x, y);
\end{aligned}$$

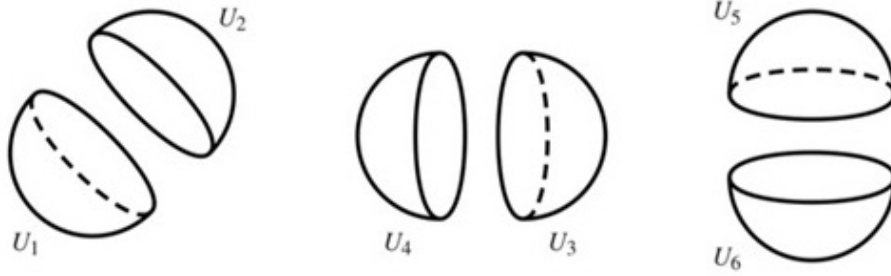


Figura E.5: Representação geométrica dos hemisférios de uma 2-esfera, $\mathbb{S}^2$.

• **Verificando que as cartas cobrem a esfera:**

- U_1 : Para qualquer ponto no hemisfério frontal ($x > 0$), a projecção no plano yz - (ϕ_1) fornece um ponto em $\mathbb{R}^2$;
- U_2 : Para qualquer ponto no hemisfério posterior ($x < 0$), a projecção no plano yz - (ϕ_2) fornece um ponto em $\mathbb{R}^2$;
- U_3 : Para qualquer ponto no hemisfério à direita ($y < 0$), a projecção no plano xz - (ϕ_3) fornece um ponto em $\mathbb{R}^2$;
- U_4 : Para qualquer ponto no hemisfério à esquerda ($y > 0$), a projecção no plano xz - (ϕ_4) fornece um ponto em $\mathbb{R}^2$;
- U_5 : Para qualquer ponto no hemisfério superior ($z > 0$), a projecção no plano xy - (ϕ_5) fornece um ponto em $\mathbb{R}^2$;

- U_6 : Para qualquer ponto no hemisfério inferior ($z < 0$), a projeção no plano xy - (ϕ_6) fornece um ponto em $\mathbb{R}^2$;

Que neste caso, são considerados como domínios de mapas cuja união cobre $\mathbb{S}^2$ completamente e as cartas são as projeções dos hemisférios em discos abertos. As seis cartas $\{U_1, U_2, U_3, U_4, U_5, U_6\}$ cobrem a 2-esfera porque cada ponto na esfera pertence a pelo menos um desses conjuntos abertos. Cada carta projeta um hemisfério em um plano e ao combinar essas projeções, toda a esfera é coberta.

E.2.3.7 Generalização das coordenadas

Doravante, adotar-se-ão as coordenadas $\{x^1, x^2, x^3\}$, sem perda da generalidade, para simplificação de cálculos.

E.2.3.8 Descrição da Esfera

$$\mathbb{S}^2 = \{(x^1, x^2, x^3) \in \mathbb{R}^3 \mid (x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2 = 1\} \quad (\text{E.10})$$

• Definição das Cartas

As seis cartas que correspondem aos seis hemisférios, serão descritas como:

$$U_i^\pm = \{(x^1, x^2, x^3) \in \mathbb{S}^2 \mid \pm x^i > 0\} \quad (\text{E.11})$$

• Definição dos Discos

$$D_{ij} = \{(x^i, x^j) \in \mathbb{R}^2 \mid (x^i)^2 + (x^j)^2 < 1\} \quad (\text{E.12})$$

Tal que:

$$\varphi_1^+ : U_1^+ \rightarrow D_{23} \quad (\text{E.13})$$

De (E.13), tem-se que:

$$\varphi_1^+(x^1, x^2, x^3) = (x^2, x^3) \quad (\text{E.14})$$

Desta forma as seis cartas, denotadas por $\varphi_i^\pm$, neste caso, têm-se que $\{i = 1, \dots, 3\}$, juntas, formam um atlas da 2-esfera.

E.2.3.9 Definição do Atlas

Para se construir um atlas diferenciável, tem-se que voltar para a 2-esfera $\mathbb{S}^2$ e ao atlas das seis cartas da projeção, que denotar-se-á por $\mathcal{A} = \{\varphi_1^\pm, \varphi_2^\pm, \varphi_3^\pm\}$ e irá se perquirir se é diferenciável. Para isso, escolhe-se arbitrariamente as cartas φ_3^+ e φ_1^+ , cujos domínios são os hemisférios cuja denominação será *norte* e *leste*, respectivamente, que se sobrepõem em *nordeste*. Seja, portanto, $p = (p_1, p_2, p_3)$ um ponto na sobreposição de domínios, então, dar-se-ão infradescritas as descrições das udas cartas citadas:

$$\varphi_3^+(p) = (p^1, p^2) \quad (\text{E.15})$$

$$\varphi_1^+(p) = (p^2, p^3) \quad (\text{E.16})$$

Tomando-se a inversa de (E.15)

$$(\varphi_3^+)^{-1}(p) = (p^1, p^2) = \left(p^1, p^1, \sqrt{1 - (p^1)^2 + (p^2)^2}\right) \quad (\text{E.17})$$

$$\varphi_1^+ \circ (\varphi_3^+)^{-1}(p_1, p_2) = \left(p_2, \sqrt{1 - (p_1)^2 - (p_2)^2}\right) \quad (\text{E.18})$$

É obviamente diferenciável, o mesmo se aplica a todas aos outros mapas de mudanças de coordenadas entre cartas do atlas $\mathcal{A}$ e portanto, $\mathbb{S}^2$ é uma variedade diferenciável.

Exemplo E.2.5. *Seja um mapa diferenciável, $f : \mathbb{S}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2$ um mapa que gira a esfera em 45° em torno de seu eixo z . Escolhendo-se um ponto p no quadrante positivo de $\mathbb{S}^2$ no qual todas as coordenadas são positivas. Pode-se combinar f com as cartas para definir o mapa*

$$\left(\varphi_1^+ \circ (\varphi_3^+)^{-1}\right)(p_1, p_2) = \left(\frac{p_1 + p_2}{\sqrt{2}}, \sqrt{1 - (p_1)^2 - (p_2)^2}\right) \quad (\text{E.19})$$

Que é evidentemente diferenciável.

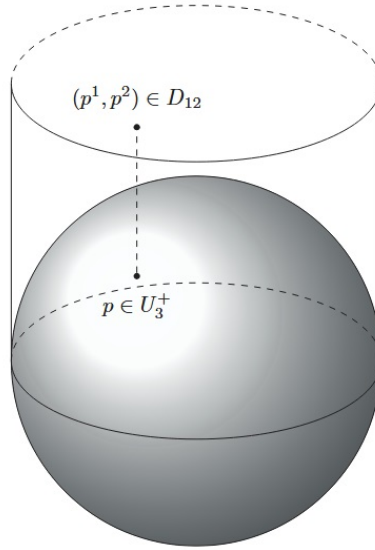


Figura E.6: Exemplo de carta, em que figurou na descrição acima explicando o ponto p no hemisfério U_3^+ da 2-esfera é projetado no domínio $D_{12} \subset \mathbb{R}^2$.

E.2.3.10 Esfera de Bloch como Variedade Diferenciável

A 2-esfera de Bloch, representada por vetores de Bloch em um espaço vetorial complexo bidimensional $\mathbb{C}^2$, é uma variedade diferenciável. Em coordenadas polares, isso é facilmente observado expressando os vetores de Bloch em termos das coordenadas esféricas (θ, ϕ) . Essa representação dá permissividade para definir um diagrama diferenciável, e a suavidade da transição entre os diferentes diagramas o que demonstra a estrutura da variedade diferenciável.

E.2.3.11 Representação dos Vetores de Bloch em Coordenadas Esféricas

Sejam os componentes do vetor de Bloch em termos de θ e φ : O vetor de Bloch pode ser expresso como um vetor de 3 componentes (x, y, z) , em que cada componente está relacionada às coordenadas esféricas: $x = \sin(\theta) \cos(\varphi)$, $y = \sin(\theta) \sin(\varphi)$, $z = \cos(\theta)$.

• Representação da Esfera de Bloch

A esfera de Bloch é uma representação geométrica de um qubit quântico. Mapeia os estados do qubit em pontos na superfície de uma esfera no espaço tridimensional, sendo cada ponto na esfera corresponde a um estado único do qubit.

E.2.3.12 Coordenadas Polares

Pode-se representar qualquer ponto na esfera de Bloch usando coordenadas polares (θ, φ) em que θ é o ângulo azimutal, (longitude) e φ é o ângulo polar (latitude). O vetor de Bloch pode ser

escrito em termos dessas coordenadas polares, como já descrito acima da forma seguinte:

$$|\psi\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + \sin(\theta/2)e^{i\theta}|1\rangle \quad (\text{E.20})$$

E.2.3.13 Cartas

A função que mapeia as coordenadas polares (θ, φ) para o vetor de Bloch $(|\psi\rangle)$ define uma carta. Esta função é³:

$$\phi : (\theta, \varphi) \in U \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow |\psi\rangle \in \mathbb{S}^2 \subseteq \mathbb{R}^3, i = \{1, \dots, 6\} \quad (\text{E.21})$$

Em que $\mathbb{S}^2$ é a esfera de Bloch em sua representação bidimensional. Esta função é diferenciável porque os componentes do vetor de Bloch são funções trigonométricas de θ e φ , que são funções diferenciáveis.

Proposição E.2.3. *As seis cartas que cobrem a 2-esfera podem ser obtidas a partir do formalismo do mapeamento do cubo.*

prova. Seis cartas podem ser construídas usando as seis faces de um cubo inscrito na esfera, (mapeamento do cubo).

- **Primeiro Passo:** Deve-se dar a definição do cubo construir seis cartas baseadas nas faces de um cubo inscrito na esfera. Seja a esfera centrada na origem com raio $r = 1$, portanto, a equação da esfera será dada por $x^2 + y^2 + z^2 = 1$.
- **Definição do Cubo:** Inscruva um cubo na esfera. Neste caso os vértices do cubo estão em $(\pm a, \pm a, \pm a)$, em que $a = \frac{1}{\sqrt{3}}$.
- **Definindo os Hemisférios:**
 - $U_1 = a, (\theta, \varphi) = (a, \theta, \phi), x > 0$, hemisfério frontal;
 - $U_2 = -a, (\theta, \varphi) = (-a, \theta, \phi), x < 0$, hemisfério posterior;
 - $U_3 = a, (\theta, \varphi) = (\theta, \phi, a), y > 0$, hemisfério direito;
 - $U_4 = -a, (\theta, \varphi) = (\theta, -a, \phi), y < 0$, hemisfério esquerdo;
 - $U_5 = a, (\theta, \varphi) = (\theta, \phi, a), z > 0$, hemisfério superior;
 - $U_6 = -a, (\theta, \varphi) = (\theta, \phi, -a), z < 0$, hemisfério inferior.

³Seja $\phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{S}^2 \subseteq \mathbb{R}^3$, dada por $\phi(\theta, \phi) = (\sin(\theta)\cos(\phi), \sin(\theta)\sin(\phi), \cos(\theta))$

- **Definição das Cartas:**

$$x_+ = a, (\theta, \varphi) \rightarrow (a, \theta, \varphi), \text{ em que } -\frac{\pi}{4} \leq \theta, \varphi \leq \frac{\pi}{4};$$

$$x_- = -a, (\theta, \varphi) \rightarrow (-a, \theta, \varphi), \text{ em que } -\frac{\pi}{4} \leq \theta, \varphi \leq \frac{\pi}{4};$$

$$y_+ = a, (\theta, \phi) \rightarrow (\theta, a, \varphi), \text{ em que } -\frac{\pi}{4} \leq \theta, \phi \leq \frac{\pi}{4};$$

$$y_- = -a, (\theta, \varphi) \rightarrow (\theta, -a, \varphi), \text{ em que } -\frac{\pi}{4} \leq \theta, \varphi \leq \frac{\pi}{4};$$

$$z_+ = a, (\theta, \varphi) \rightarrow (\theta, \varphi, a), \text{ em que } -\frac{\pi}{4} \leq \theta, \varphi \leq \frac{\pi}{4};$$

$$z_- = -a, (\theta, \varphi) \rightarrow (\theta, \varphi, -a), \text{ em que } -\frac{\pi}{4} \leq \theta, \varphi \leq \frac{\pi}{4};$$

Projete os gráficos na esfera

- **Projete os gráficos na esfera:**

Projetar cada ponto (θ, φ) da face do cubo para a esfera: Por exemplo, para a carta (x_+) , a projeção é:

$$x' = a;$$

$$y' = \theta \sqrt{\frac{1-a^2}{a^2+\theta^2+\varphi^2}};$$

$$z' = \varphi \sqrt{\frac{1-a^2}{a^2+\theta^2+\varphi^2}}.$$

- **Normalizando o ponto projetado para estar na esfera:**

$$x'' = \frac{x'}{\sqrt{x'^2+y'^2+z'^2}};$$

$$y'' = \frac{y'}{\sqrt{x'^2+y'^2+z'^2}};$$

$$z'' = \frac{z'}{\sqrt{x'^2+y'^2+z'^2}}.$$

Uma esfera pode ser coberta por seis gráficos usando projeções das faces de um cubo inscrito.

□

Exemplo E.2.6 (Um exemplo de Cartas para a Esfera de Bloch).

$$\begin{aligned} x_+ : \theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = 0 &\longrightarrow \cos \frac{\pi}{4} |0\rangle + e^{i \cdot 0} \sin \frac{\pi}{4} |1\rangle = \\ &\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \equiv |+\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_- : \theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = \pi &\longrightarrow \cos \frac{\pi}{4} |0\rangle + e^{i\pi} \sin \frac{\pi}{4} |1\rangle = \\ &\frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \end{aligned}$$

Levando-se em conta que:

- $\# e^{i \cdot 0} = e^0 = 1;$
- $\mathcal{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle;$
- *Identidade de Euler* : $e^{i\pi} + 1 = 0, e^{i\pi} = -1$
- $\mathcal{H}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$

$$\begin{aligned} y_+ : \theta = \frac{\pi}{2} \longrightarrow \cos \frac{\pi}{4} |0\rangle + e^{i \frac{3\pi}{2}} \sin \frac{\pi}{4} |1\rangle = \\ \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle + i \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle = \\ \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{i}{\sqrt{2}} |1\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y_- : \theta = \frac{\pi}{2}, \varphi = \frac{3\pi}{2} \longrightarrow \cos \frac{\pi}{4} |0\rangle + e^{i \frac{3\pi}{2}} \sin \frac{\pi}{4} |1\rangle = \\ \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - i \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle = \\ \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - i \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle = \\ \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle - i \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle. \end{aligned}$$

Considerando-se:

- $\# e^{i \frac{3\pi}{2}} = \cos \frac{3\pi}{2} + i \sin \frac{3\pi}{2} = 0 - i \cdot 1 = -i$

$$\begin{aligned} z_+ : \theta = 0, \varphi = 0 \longrightarrow \cos \frac{0}{2} |0\rangle + e^{i \cdot 0} \sin \frac{0}{2} |1\rangle = \\ \cos 0 |0\rangle + (1) \sin 0 |1\rangle = \\ |1\rangle + 0 |1\rangle = |0\rangle. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
z_- : \theta = \pi, \varphi = 0 &\longrightarrow \cos \frac{\pi}{2} |0\rangle + e^{i \cdot 0} \sin \frac{\pi}{2} |1\rangle = \\
&\cos 0 |0\rangle + (1) \sin \frac{\pi}{2} |1\rangle = \\
&0 |0\rangle + 1 |1\rangle = \\
&|1\rangle.
\end{aligned}$$

Levando-se em conta que:

- $\# e^{i \cdot 0} = e^0 = 1$;
- $\mathcal{H}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$;
- Identidade de Euler : $e^{i\pi} + 1 = 0, e^{i\pi} = -1$
- $\mathcal{H}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle$

Considerando-se:

- $\# e^{i \frac{3\pi}{2}} = \cos \frac{3\pi}{2} + i \sin \frac{3\pi}{2} = 0 - i \cdot 1 = -i$

E.3 Fibrado de Hopf

E.3.1 Descrição Inicial

Um fibrado complexo de Hopf é um S^1 -fibrado principal não-trivial canônico sobre a 2-esfera cujo espaço total é a 3-esfera.

- **Definição Formal de Fibrados**

Definição E.3.1. *Define-se um fibrado (no caso para variedades topológicas) como sendo uma 3-ênupla (E, π, M) em que E e M são variedades topológicas denominadas de espaço total e espaço base, respectivamente e π é um mapa contínuo e sobrejetor $\pi : E \rightarrow M$ denomina-se projeção.*

Observação E.3.1. *Sem perda de generalidade, em geral denota-se um fibrado (E, π, M) , da maneira seguinte $E \xrightarrow{\pi} M$*

Definição E.3.2. *Seja $E \xrightarrow{\pi} M$ um fibrado e seja $p \in M$. Então, denota-se $F_p := \text{preim}_{\pi}(p)$ é denominada de fibra no ponto p .*

Observação E.3.2. *Intuitivamente, a fibra no ponto $p \in M$ é um conjunto de pontos em E , (cuja representação na figura é de uma reta), ligados ao ponto p . O mapa projeção envia todos os pontos da fibra F_p para o ponto p .*

$$\mathbb{S}^1 \hookrightarrow \mathbb{S}^3 \rightarrow \mathbb{S}^2 \quad (\text{E.22})$$

E.3.1.1 Sobre a Esfera

- **Caracterização via Teoria da Homotopia**

O espaço de Eilenberg-MacLane $K(\mathbb{Z}, 2) \cong B\mathbb{S}^1$ é o espaço de classificação para fibrados principais de grupos circulares. Por sua própria natureza, possui um único grupo de homotopia não trivial, o segundo, e este é isomorfo ao grupo dos inteiros.

$$\pi_2(K(\mathbb{Z}, 2)) \cong \mathbb{Z} \quad (\text{E.23})$$

Isto significa que existe, além de homotopias, um mapa canônico (além do sinal), contínuo da 2-esfera

$$\varphi : \mathbb{S}^2 \rightarrow K(\mathbb{Z}, 2) \quad (\text{E.24})$$

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{S}^1 & \hookrightarrow & \mathbb{S}^3 \\ & & \downarrow \\ & & \mathbb{S}^2 \longrightarrow B\mathbb{S}^1 \cong K(\mathbb{Z}, 2) \end{array}$$

Em outras palavras, trata-se o fibrado de Hopf do fibrado $U(1)$ com classe de Chern unitária em $\mathbb{S}^2$.

E.3.1.2 Realização via Números Complexos

Um espaço topológico que apresenta de forma explícita o fibrado de Hopf pode ser obtido da seguinte forma infradescreta

$$\mathbb{S}^3 = \{(z_0, z_1) \in \mathbb{C} \times \mathbb{C} \mid |z_0|^2 + |z_1|^2 = 1\} = \mathbb{S}(\mathbb{C}^2) \quad (\text{E.25})$$

Deve-se salientar que é possível fazer-se as seguintes identificações:

$$\mathbb{S}^2 \cong \mathbb{CP}^1 \cong \mathbb{C} \sqcup \{\infty\} \quad (\text{E.26})$$

Há uma função contínua $\mathbb{S}^3 \rightarrow \mathbb{S}^2$, que é assim definida:

$$(z_0, z_1) \mapsto \frac{z_0}{z_1} \quad (\text{E.27})$$

Isto fornece o fibrado de Hopf, desta forma, é o fibrado circular naturalmente associado ao fibrado de retas canônico. Há uma forma alternativa, para se discorrer sobre este resultado que se fará apresentação nas linhas abaixo:

$$\mathbb{S}^3 \cong \{(z, x) \in \mathbb{C} \times \mathbb{R} \mid |z|^2 + x^2 = 1\} = \mathbb{S}(\mathbb{C} \times \mathbb{R}) \quad (\text{E.28})$$

e identificar esta apresentação da 2-esfera com a reta projetiva complexa via projeção estereográfica, então o fibrado de Hopf é identificada com o mapa

$$(z_0, z_1) \mapsto (2z_0\bar{z}_1, |z_0|^2 - |z_1|^2) \quad (\text{E.29})$$

E.3.1.3 Realização via Quatérnios

Hexiste ainda outra possibilidade, uma ve que se pode considerar $\mathbb{S}^3 \cong \mathbb{S}(\mathbb{H})$ como a esfera unitária nos quatérnios e $\mathbb{S}^2 \cong \mathbb{S}(\mathbb{H}_{im})$, como sendo a esfera unitária nos quatérnios imaginários.

Sob essa identificação, o fibrado complexo de Hopf é representado equivalentemente por

$$\begin{aligned} \mathbb{S}(\mathbb{H}) &\rightarrow (\mathbb{H}_{im}) \\ q &\rightarrow q \cdot \mathbf{i} \cdot \bar{q}. \end{aligned}$$

Em que $i \in \mathbb{S}(\mathbb{H}_{im})$ é um quatérnion imaginário unitário arbitrário.

E.3.1.4 Realização via Construção de Hopf

Seja $\mathbb{S}^1 = U(1)$ equipado com sua estrutura de grupo circular, portanto, pode-se considerar $\mathbb{S}^1$ em particular um espaço H . O fibrado de Hopf $\mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{S}^3 \rightarrow \mathbb{S}^2$ é a construção de Hopf aplicada a este H -espaço.

E.3.1.5 Equivariância de $Spin(3)$

Seja a ação de $Spin(3)$ na esfera $\mathbb{S}^2$, que é induzida pela ação definidora em $\mathbb{R}^3$ sob a identificação $\mathbb{S}^2 \cong \mathbb{S}(\mathbb{R}, 3)$, a ação de $Spin(3)$ na esfera $\mathbb{S}^3$, que é induzida sob o isomorfismo $Spin(3) \cong$

$Sp(1) = U(1, \mathbb{H})$, pela ação canônica à esquerda de $U(1, \mathbb{H})$ em $\mathbb{H}$ via $\mathbb{S}^3 \cong \mathbb{S}(\mathbb{H})$.

Destarte, o fibrado complexa de Hopf $\mathbb{S}^3 \xrightarrow{h_{\mathbb{C}}} \mathbb{S}^2$ é equivariante em relação a essas ações. Uma maneira de tornar a equivariância de $Spin(3)$ do fibrado complexa de Hopf totalmente explícita é observar que é equivalentemente ao seguinte mapa de espaços *coset*:

$$\begin{aligned} \mathbb{S}^1 &\xrightarrow{\text{fib}(h_{\mathbb{C}})} \mathbb{S}^3 \xrightarrow{h_{\mathbb{C}}} \mathbb{S}^2 \\ = & \quad = \quad = \\ \frac{Spin(2)}{Spin(1)} &\rightarrow \frac{Spin(3)}{Spin(1)} \rightarrow \frac{Spin(3)}{Spin(2)} \end{aligned}$$

E.3.1.6 1-Esfera, 3-Esfera, 7-Esfera e 15-Esfera, Via Normas e Projeções

Para cada uma das álgebras de divisão normadas sobre os seguintes corpos $\mathbb{R}$, $\mathbb{C}$, quatérnios e octônios, que serão denotados respectivamente, da forma seguinte, $A = \mathbb{R}, \mathbb{C}, \mathbb{H}, \mathbb{O}$ há um fibrado de Hopf correspondente de Hopf invariante um. O espaço total do fibrado é o espaço dos pares $(\alpha, \beta) \in A^2$ de norma unitária: $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Isso resulta em esferas de dimensões $\{1, 3, 7 \text{ e } 15\}$, respectivamente. O espaço base do fibrado é o espaço projetivo $\mathbb{P}^1(A)$, resultando em esferas de dimensão $\{1, 2, 4 \text{ e } 8\}$, respectivamente. Em cada caso, o fibrado de Hopf é o mapa

$$\mathbb{S}^{2n-1} \rightarrow \mathbb{S}^{2n-1} \tag{E.30}$$

Neste caso, $(n = 1, \dots, 4)$, que leva o par (α, β) em $\alpha \setminus \beta$.

E.3.1.7 Por meio de Construção

Quando $\mathbb{S}$ é uma esfera que é um H -espaço, a saber, um dos grupos $\mathbb{S}^0 = 1$, o grupo trivial, $\mathbb{S}^1 = \mathbb{Z}/2$, o grupo de ordem 2, o grupo unitário especial da 3-esfera $SU(2)$ ou a 7-esfera com sua estrutura de laço de Moufang, então a construção de Hopf produz os quatro fibrados de Hopf já descritos:

- $\mathbb{S}^0 \hookrightarrow \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{S}^1$ – fibrado de Hopf real;
- $\mathbb{S}^1 \hookrightarrow \mathbb{S}^3 \rightarrow \mathbb{S}^2$ – fibrado complexo de Hopf;
- $\mathbb{S}^3 \hookrightarrow \mathbb{S}^7 \rightarrow \mathbb{S}^4$ – fibrado quaterniônico de Hopf;
- $\mathbb{S}^7 \hookrightarrow \mathbb{S}^{15} \rightarrow \mathbb{S}^8$ – fibrado octoniônico de Hopf.

E.3.1.8 Intuição Física sobre a Esfera de Bloch e o Fibrado de Hopf

A métrica natural na esfera de Bloch é a métrica de Fubini-Study. O mapeamento da 3-esfera unitária no espaço de estados bidimensional $\mathbb{C}^2$ para a esfera de Bloch é o fibrado de Hopf, com cada raio de espinores mapeando para um ponto na esfera de Bloch. Em suma, em termos mais matemáticos/geométricos, a esfera de Bloch é identificada com $\mathbb{CP}^1$, que é o espaço projetivo complexo unidimensional, também conhecido como esfera de Riemann neste contexto abstrato.

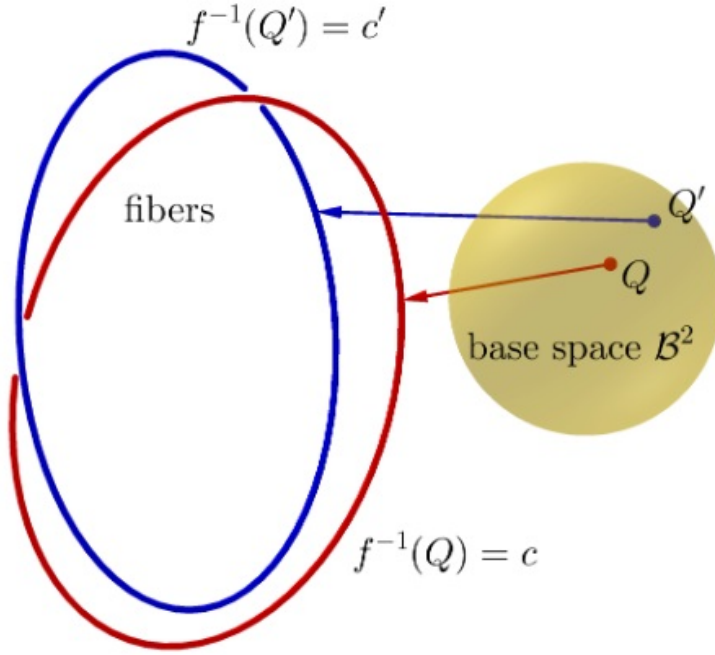


Figura E.7: Fibrado de Hopf. Fonte: [245].

Apêndice F

Significado Geométrico das Matrizes de Pauli

F.1 Introdução

Tem-se um bom conhecimento do significado geométrico dos números complexos, como o significado da unidade imaginária i que é girar um vetor em 90° , entre outros, dar-se-á mui rapidamente os significados geométricos intuitivos de matrizes de Pauli, $SU(2)$, $SO(3)$ [246] e suas relações que são frequentemente usadas na mecânica e na computação quânticas.

- Matrizes de Pauli

$$\begin{aligned}\sigma_1 = \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \sigma_2 = \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \\ \sigma_3 = \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{F.1}$$

Sendo que originalmente agem em vetores no espaço complexo bidimensional, mas, pode-se aferir ser consideradas matrizes (operadores) no espaço real $2D$, um plano real, portanto, pode-se verificar sem dificuldades sua significação geométrica de forma intuitiva em um plano usual, (note-se que $i\sigma_y$ é um operador efetivo como um todo, mas não há uma definição direta de σ_y neste espaço neste caso, portanto, trata-se de um processo de emulação.)

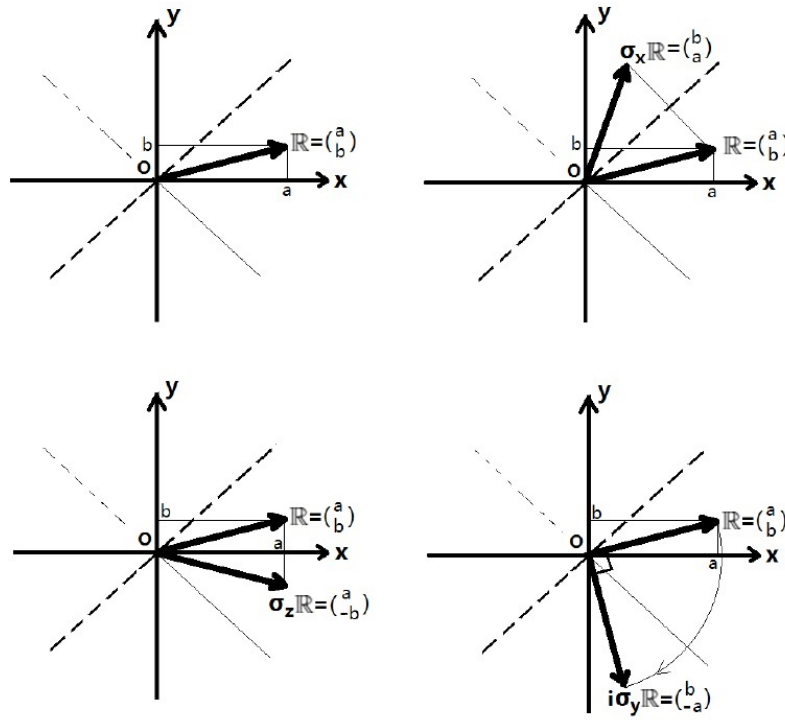


Figura F.1: Representação da ação das matrizes de Pauli no espaço $2D$.

- *Coordenadas Cartesianas do Plano*

Supondo-se inicialmente que as coordenadas cartesianas de um ponto seja descrita da forma canônica, (a, b) , em que a e $b \in \mathbb{R}$. Agora, pode-se escrever a representação de seu vetor posição como:

$\mathbb{R} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, então, ter-se-á:

$\sigma_x \mathbb{R} = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}$, $i\sigma_y \mathbb{R} = \begin{pmatrix} b \\ -a \end{pmatrix}$, $\sigma_z \mathbb{R} = \begin{pmatrix} b \\ -a \end{pmatrix}$. Mediante o exposto, pode-se afirmar que:

- σ_x é um operador que transforma um vetor em sua imagem espelhada em torno da reta, em 45° , (nesta acepção, $y = x$), $i\sigma_y$ trata-se de um operador que gira um vetor em 90° no sentido horário e σ_z um que transforma um vetor em sua imagem espelhada em torno do eixo x ;
- Tendo como possibilidade que de uma reflexão de um ponto duas vezes em torno de uma reta pode simplesmente retornar ao original, pode-se entender intuitivamente e de forma imediata.

Como segue infradescrito, têm-se que:

- $\sigma_x \sigma_x \mathbb{R} = \mathbb{R}$ ou resumidamente: $\sigma_x^2 = \sigma_z^2 = 1$. Como operar um vetor com rotação dupla de

90° no sentido horário apenas obtém-se seu inverso, então é conveniente escrever $(i\sigma_y)^2 = 1$, isso significa indiretamente $\sigma_y^2 = 1$. Além disso, $(\sigma_x)^2 = 1$, $(\sigma_z)^2 = 1$ e $(i\sigma_y)^2 = 1$.

As matrizes de Pauli As matrizes de Pauli obedecem às seguintes relações de comutação:

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\varepsilon_{jkl} \sigma_l, \quad (\text{F.2})$$

em que figura o símbolo de Levi-Civita ε_{jkl} , as relações de comutação elencadas, vertem as matrizes de Pauli em geradoras de uma representação da álgebra de Lie:

$$(\mathbb{R}^3, \times) \cong \mathfrak{su}(2) \cong \mathfrak{so}(3). \quad (\text{F.3})$$

Alguns comutadores explícitos seguem:

$$\begin{aligned} [\sigma_1, \sigma_1] &= 0 \\ [\sigma_1, \sigma_2] &= 2i\sigma_3 \\ [\sigma_2, \sigma_3] &= 2i\sigma_1 \\ [\sigma_3, \sigma_1] &= 2i\sigma_2 \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

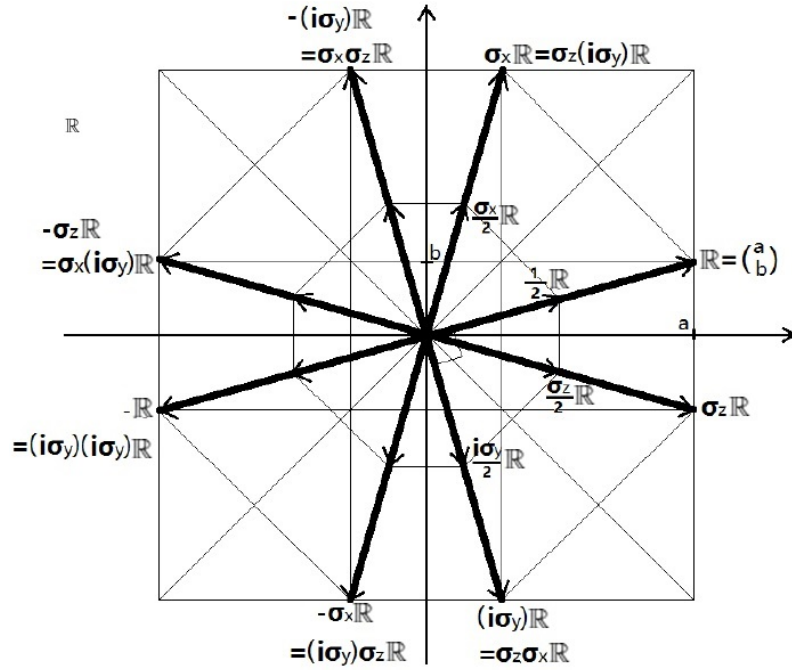


Figura F.2: Representação do tópico Coordenadas Cartesianas do Plano.

Apêndice G

Geometrias de Thurston

G.1 Definição

No ano de 1982, W. P. Thurston, [188] estruturou um programa destinado a classificar variedades tridimensionais suaves, desta forma, tendo como consequência direta, dar a resolução da conjectura de Poincaré investigando as possíveis geometrias nessas 3-variedades. O elemento chave desta classificação, como é usual na área de pesquisa em computação quântica seria o *Ansatz* é o conceito de geometria modelo.

Definição G.1.1. *Uma geometria de modelo (G, X) consiste em uma variedade X simplesmente conexa juntamente com um grupo de Lie G de difeomorfismos atuando transitivamente em X , preenchendo um certo conjunto de condições.*

Uma destas é a existência de uma métrica Riemanniana G -invariante. Por exemplo, reduzindo-se a dimensão, dá-se permissividade para se considerar geometrias modelos bidimensionais de uma variedade X bidimensional. Da geometria Riemanniana, sabe-se que qualquer métrica Riemanniana G -invariante em X tem curvatura gaussiana constante, também deve se levar em conta que G deve ser transitiva. Uma escala constante da métrica permite normalizar a curvatura para valores constantes, a saber, 0, 1 ou -1 , correspondendo aos espaços euclidiano, que denota-se usualmente como sendo $\mathbb{E}^2$, esférico, $\mathbb{S}^2$ e hiperbólico $\mathbb{H}^2$, respectivamente. Assim, existem precisamente três geometrias de modelos bidimensionais: esférica, euclidiana e hiperbólica.

Para o análogo tridimensional, existe um número finito de geometrias modelos. Descobriu-se que existem oito geometrias: esférica, euclidiana, hiperbólica, mista esférica-euclidiana, mista hiperbólica-euclidiana e três casos excepcionais, [247]. Pode-se afirmar que uma estrutura geométrica em uma variedade M mais geral, que não é necessariamente simplesmente conexa, é definida

por uma geometria modelo (G, X) , em que X é o recobrimento universal para M , ou seja, $M = X/\pi_1(M)$. Isso equivale a uma representação $\pi_1(M) \rightarrow G$ do grupo fundamental em G .

Definição G.1.2 (Geometrias Modelo). *Uma estrutura geométrica em uma variedade M é um difeomorfismo de M em X/Γ para alguma geometria modelo X , em que Γ é um subgrupo discreto de G agindo livremente em X ; este é um caso especial de uma estrutura completa (G, X) . Se uma dada variedade admite uma estrutura geométrica, então admite uma cujo modelo é maximal.*

Naturalmente, que uma estrutura geométrica em uma 3-variedade pode não ser única, mas, Thurston explorou decomposições em partes, cada uma das quais admite uma estrutura geométrica única. Essa decomposição prossegue dividindo M em partes essencialmente únicas usando 2-esferas e 2-toros mergulhados, de tal forma que uma geometria modelo possa ser definida em cada parte.

Definição G.1.3 (Variedades Primas). *Uma variedade prima é uma n -variedade é a que não pode ser expressa como uma soma conexa não trivial de duas n -variedades. Não trivial significa que nenhuma das duas é uma n -esfera.*

Definição G.1.4 (Variedades Irredutíveis). *Uma n -variedade irredutível, é aquela em que qualquer esfera $(n - 1)$ mergulhada limita uma n -bola mergulhada.*

Em suma, a conjectura da geometrização de Thurston, diz que o interior de toda 3-variedade compacta tem uma decomposição canônica em peças, descritas acima, que possuem uma das oito estruturas geométricas. De maneira mais formalizada:

Conjectura G.1.1. *Toda 3-variedade pode ser decomposta de forma única ao longo de 2-esferas em variedades primas, em que algumas dessas podem ser posteriormente divididas ao longo de 2-toros em um grafo G e variedades hiperbólicas $\mathbb{H}$. Então, $G, \mathbb{H}$ têm uma união disjunta de 2-toros como contorno.*

Há possibilidade de se construir essas variedades com uma estrutura geométrica, no caso em tela, utiliza-se a teoria dos nós, [247], um nó é um mergulho de um círculo na 3-esfera (ou em $\mathbb{R}^3$), ou seja, uma curva com nó fechado. Seja K um nó primo (um nó não decomponível pela soma de dois nós). Com $K \times D^2$, denota-se um nó espesso, ou seja, um toro sólido com nó fechado. O complemento de nó denotado por $C(K) = \mathbb{S}^3 \setminus (K \times D^2)$ é uma 3-variedade com bordo denotado por $\partial C(K) = T^2$. Fora demonstrado que nós primos são divididos em duas classes:

- nós hiperbólicos ($C(K)$ admitem uma estrutura hiperbólica);

- nós não hiperbólicos ($C(K)$ admitem uma das outras sete estruturas geométricas).

Um mergulho de círculos disjuntos em $\mathbb{S}^3$ é denominado de enlace L . Então, denota-se por $C(L)$ o complemento do enlace. Aqui, a situação é mais complexa: $C(L)$ pode admitir uma estrutura geométrica ou pode ser decomposto em partes com uma estrutura geométrica. $C(L), C(K)$ são um dos principais modelos para G ou H para nós adequados e links. Se discorre-se sobre 3-variedades, tem-se que considerar $C(K)$ como uma das peças básicas. Além disso, existe o teorema de Gordon-Luecke, que *grosso modo*, pode ser assim descrito: se dois complementos de nós são homeomorfos, então os nós são equivalentes. Curiosamente, os complementos de nós de outros que são primos são determinados por seu grupo fundamental. Para o grupo fundamental, consideram-se curvas fechadas que não são contráteis. Além disso, duas curvas são equivalentes se for possível deformá-las uma na outra (relação de homotopia). A concatenação de curvas pode ser transformada em uma operação de grupo até a equivalência de deformação (ou seja, homotopia). Formalmente, é o conjunto de classes de homotopia $[\mathbb{S}^1, X]$ de mapas $\mathbb{S}^1 \rightarrow X$ (as curvas fechadas) em um espaço X além de homotopias, denotado por $\pi_1(X)$. O grupo fundamental $\pi_1(C(K))$ do complemento de nós também é conhecido como grupo de nós. Aqui, faz-se referência às obras como por exemplo, [182], para uma boa introdução a esta teoria. A ideia principal é apenas discorrer de forma rápida sobre o uso do grupo de nós como substituto para uma 3-variedade e tentar usar este grupo para computação quântica.